

PCT

NOTIFICATION OF ELECTION

(PCT Rule 61.2)

From the INTERNATIONAL BUREAU

To:

Assistant Commissioner for Patents
United States Patent and Trademark
Office
Box PCT
Washington, D.C.20231
ETATS-UNIS D'AMERIQUE

in its capacity as elected Office

Date of mailing:

05 October 2000 (05.10.00)

International application No.:

PCT/EP00/02292

Applicant's or agent's file reference:

LEA33628-WO

International filing date:

15 March 2000 (15.03.00)

Priority date:

27 March 1999 (27.03.99)

Applicant:

MÜLLER, Klaus-Helmut et al

1. The designated Office is hereby notified of its election made:



in the demand filed with the International preliminary Examining Authority on:

01 August 2000 (01.08.00)



in a notice effecting later election filed with the International Bureau on:

2. The election ☒ was



was not

made before the expiration of 19 months from the priority date or, where Rule 32 applies, within the time limit under Rule 32.2(b).

The International Bureau of WIPO
34, chemin des Colombettes
1211 Geneva 20, Switzerland

Facsimile No.: (41-22) 740.14.35

Authorized officer:

J. Zahra

Telephone No.: (41-22) 338.83.38

**VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT
AM DEM GEBIET DES PATENTWESENS**

PCT

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

(Artikel 18 sowie Regeln 43 und 44 PCT)

Aktenzeichen des Anmelders oder Anwalts LEA33628-WO	WEITERES VORGEHEN siehe Mitteilung über die Übermittlung des internationalen Recherchenberichts (Formblatt PCT/ISA/220) sowie, soweit zutreffend, nachstehender Punkt 5	
Internationales Aktenzeichen PCT/EP 00/ 02292	Internationales Anmeldedatum (Tag/Monat/Jahr) 15/03/2000	(Frühestes) Prioritätsdatum (Tag/Monat/Jahr) 27/03/1999
Anmelder BAYER AG		

Dieser internationale Recherchenbericht wurde von der Internationalen Recherchenbehörde erstellt und wird dem Anmelder gemäß Artikel 18 übermittelt. Eine Kopie wird dem Internationalen Büro übermittelt.

Dieser internationale Recherchenbericht umfaßt insgesamt 4 Blätter.

☒ Darüber hinaus liegt ihm jeweils eine Kopie der in diesem Bericht genannten Unterlagen zum Stand der Technik bei.

1. Grundlage des Berichts

- a. Hinsichtlich der **Sprache** ist die internationale Recherche auf der Grundlage der internationalen Anmeldung in der Sprache durchgeführt worden, in der sie eingereicht wurde, sofern unter diesem Punkt nichts anderes angegeben ist.

☐ Die internationale Recherche ist auf der Grundlage einer bei der Behörde eingereichten Übersetzung der internationalen Anmeldung (Regel 23.1 b)) durchgeführt worden.

- b. Hinsichtlich der in der internationalen Anmeldung offenbarten **Nucleotid- und/oder Aminosäuresequenz** ist die internationale Recherche auf der Grundlage des Sequenzprotokolls durchgeführt worden, das

☐ in der internationalen Anmeldung in schriftlicher Form enthalten ist.

☐ zusammen mit der internationalen Anmeldung in computerlesbarer Form eingereicht worden ist.

☐ bei der Behörde nachträglich in schriftlicher Form eingereicht worden ist.

☐ bei der Behörde nachträglich in computerlesbarer Form eingereicht worden ist.

☐ Die Erklärung, daß das nachträglich eingereichte schriftliche Sequenzprotokoll nicht über den Offenbarungsgehalt der internationalen Anmeldung im Anmeldezeitpunkt hinausgeht, wurde vorgelegt.

☐ Die Erklärung, daß die in computerlesbarer Form erfaßten Informationen dem schriftlichen Sequenzprotokoll entsprechen, wurde vorgelegt.

2. ☐ Bestimmte Ansprüche haben sich als nicht recherchierbar erwiesen (siehe Feld I).

3. ☐ Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung (siehe Feld II).

4. Hinsichtlich der Bezeichnung der Erfindung

☐ wird der vom Anmelder eingereichte Wortlaut genehmigt.

☒ wurde der Wortlaut von der Behörde wie folgt festgesetzt:

SUBSTITUIERTE BENZOYLPYRAZOLE ALS HERBIZIDE

5. Hinsichtlich der Zusammenfassung

☐ wird der vom Anmelder eingereichte Wortlaut genehmigt.

☒ wurde der Wortlaut nach Regel 38.2b) in der in Feld III angegebenen Fassung von der Behörde festgesetzt. Der Anmelder kann der Behörde innerhalb eines Monats nach dem Datum der Absendung dieses internationalen Recherchenberichts eine Stellungnahme vorlegen.

6. Folgende Abbildung der Zeichnungen ist mit der Zusammenfassung zu veröffentlichen: Abb. Nr. —

☐ wie vom Anmelder vorgeschlagen

☐ keine der Abb.

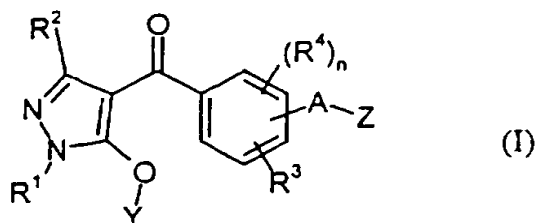
☐ weil der Anmelder selbst keine Abbildung vorgeschlagen hat.

☐ weil diese Abbildung die Erfindung besser kennzeichnet.

Feld III

WORTLAUT DER ZUSAMMENFASSUNG (Fortsetzung von Punkt 5 auf Blatt 1)

Die Erfindung betrifft neue substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I),



in welcher

- Z für eine gegebenenfalls substituierte 4- bis 12-gliedrige, gesättigte oder ungesättigte, monocyclische oder bicyclische, heterocyclische Gruppierung steht, welche 1 bis 4 Heteroatome (bis zu 4 Stickstoffatome und gegebenenfalls - alternativ oder additiv - ein Sauerstoffatom oder ein Schwefelatom, oder eine SO-Gruppierung oder eine SO₂-Gruppierung) enthält, und welche zusätzlich ein bis drei Oxo-Gruppen (C=O) und/oder Thioxo-Gruppen (C=S) als Bestandteile des Heterocyclus enthält,

sowie Verfahren zu ihrer Herstellung und ihre Verwendung als Herbizide.

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGS- GEGENSTANDES

IPK 7 C07D403/10 A01N43/653 A01N43/56 C07D401/10 C07D417/10
C07D471/04 C07D231/20 C07D413/10 C07D487/04

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

IPK 7 C07D A01N

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 99 07697 A (DEYN WOLFGANG VON ;HILL REGINA LUISE (DE); RHEINHEIMER JOACHIM (DE) 18. Februar 1999 (1999-02-18) Seite 78, Zeile 21 -Seite 79, Zeile 7 ---	1,8-10
X	WO 98 42678 A (DOW AGROSCIENCES LLC) 1. Oktober 1998 (1998-10-01) Seite 50, Zeile 19 -Seite 51, Zeile 15 ---	1,8
A	WO 98 31681 A (DEYN WOLFGANG VON ;HILL REGINA LUISE (DE); RHEINHEIMER JOACHIM (DE) 23. Juli 1998 (1998-07-23) Anspruch 1 ---	1,9,10
A	EP 0 900 795 A (NIPPON SODA CO) 10. März 1999 (1999-03-10) Ansprüche --- -/-	1,9,10



Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen



Siehe Anhang Patentfamilie

* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

"A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist

"E" älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist

"L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)

"O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht

"P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

"T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

"X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden

"Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann nahelegend ist

"&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

17. Juli 2000

Absendedatum des internationalen Recherchenberichts

27/07/2000

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde

Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

De Jong, B

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	US 5 846 907 A (HILL REGINA LUISE ET AL) 8. Dezember 1998 (1998-12-08) Ansprüche; Beispiele -----	1,9,10

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichung zur selben Patentfamilie gehören

nales Aktenzeichen

PCT/EP 00/02292

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 9907697 A	18-02-1999	AU 9066598 A EP 1003736 A	01-03-1999 31-05-2000
WO 9842678 A	01-10-1998	AU 6579198 A EP 0918755 A US 5824802 A US 5962690 A	20-10-1998 02-06-1999 20-10-1998 05-10-1999
WO 9831681 A	23-07-1998	AU 6092998 A AU 6207698 A AU 6613398 A CN 1248255 T CN 1250447 T WO 9831676 A WO 9831682 A EP 0966452 A EP 0958291 A EP 0958292 A NO 993521 A NO 993522 A PL 334847 A PL 334849 A SK 90399 A SK 91999 A	07-08-1998 07-08-1998 07-08-1998 22-03-2000 12-04-2000 23-07-1998 23-07-1998 29-12-1999 24-11-1999 24-11-1999 15-09-1999 16-09-1999 27-03-2000 27-03-2000 10-12-1999 18-01-2000
EP 0900795 A	10-03-1999	JP 10007673 A AU 1671097 A BR 9708828 A AU 1670797 A AU 1670897 A AU 1670997 A AU 2405897 A CA 2252543 A CN 1216534 A CN 1216543 A EP 0891972 A HU 9902423 A JP 10237072 A WO 9741116 A WO 9735850 A WO 9741117 A WO 9741118 A WO 9741105 A WO 9821187 A	13-01-1998 19-11-1997 03-08-1999 19-11-1997 17-10-1997 19-11-1997 19-11-1997 06-11-1997 12-05-1999 12-05-1999 20-01-1999 29-11-1999 08-09-1998 06-11-1997 02-10-1997 06-11-1997 06-11-1997 06-11-1997 22-05-1998
US 5846907 A	08-12-1998	AU 710172 B AU 4665596 A BG 101825 A BR 9607333 A CA 2210693 A CN 1175951 A CZ 9702473 A WO 9626206 A EP 0811007 A FI 973471 A HU 9800725 A JP 11500438 T LT 97145 A,B	16-09-1999 11-09-1996 30-04-1998 25-11-1997 29-08-1996 11-03-1998 13-05-1998 29-08-1996 10-12-1997 22-08-1997 28-07-1998 12-01-1999 26-01-1998

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internat. Aktenzeichen

PCT/EP 00/02292

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
US 5846907 A		LV 11895 A	20-12-1997
		LV 11895 B	20-03-1998
		NO 973861 A	22-10-1997
		NZ 301272 A	25-02-1999
		PL 322277 A	19-01-1998
		SK 104297 A	08-07-1998

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP 00/02292

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)		Publication date
WO 9907697	A	18-02-1999	AU 9066598	A	01-03-1999
			EP 1003736	A	31-05-2000
WO 9842678	A	01-10-1998	AU 6579198	A	20-10-1998
			EP 0918755	A	02-06-1999
			US 5824802	A	20-10-1998
			US 5962690	A	05-10-1999
WO 9831681	A	23-07-1998	AU 6092998	A	07-08-1998
			AU 6207698	A	07-08-1998
			AU 6613398	A	07-08-1998
			CN 1248255	T	22-03-2000
			CN 1250447	T	12-04-2000
			WO 9831676	A	23-07-1998
			WO 9831682	A	23-07-1998
			EP 0966452	A	29-12-1999
			EP 0958291	A	24-11-1999
			EP 0958292	A	24-11-1999
			NO 993521	A	15-09-1999
			NO 993522	A	16-09-1999
			PL 334847	A	27-03-2000
			PL 334849	A	27-03-2000
			SK 90399	A	10-12-1999
			SK 91999	A	18-01-2000
EP 0900795	A	10-03-1999	JP 10007673	A	13-01-1998
			AU 1671097	A	19-11-1997
			BR 9708828	A	03-08-1999
			AU 1670797	A	19-11-1997
			AU 1670897	A	17-10-1997
			AU 1670997	A	19-11-1997
			AU 2405897	A	19-11-1997
			CA 2252543	A	06-11-1997
			CN 1216534	A	12-05-1999
			CN 1216543	A	12-05-1999
			EP 0891972	A	20-01-1999
			HU 9902423	A	29-11-1999
			JP 10237072	A	08-09-1998
			WO 9741116	A	06-11-1997
			WO 9735850	A	02-10-1997
			WO 9741117	A	06-11-1997
			WO 9741118	A	06-11-1997
			WO 9741105	A	06-11-1997
			WO 9821187	A	22-05-1998
US 5846907	A	08-12-1998	AU 710172	B	16-09-1999
			AU 4665596	A	11-09-1996
			BG 101825	A	30-04-1998
			BR 9607333	A	25-11-1997
			CA 2210693	A	29-08-1996
			CN 1175951	A	11-03-1998
			CZ 9702473	A	13-05-1998
			WO 9626206	A	29-08-1996
			EP 0811007	A	10-12-1997
			FI 973471	A	22-08-1997
			HU 9800725	A	28-07-1998
			JP 11500438	T	12-01-1999
			LT 97145	A,B	26-01-1998

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP 00/02292

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 5846907 A		LV 11895 A	20-12-1997
		LV 11895 B	20-03-1998
		NO 973861 A	22-10-1997
		NZ 301272 A	25-02-1999
		PL 322277 A	19-01-1998
		SK 104297 A	08-07-1998

VERTRAG ÜBER INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS

PCT

REC'D 27 JUN 2001

WIPO PCT

INTERNATIONALER VORLÄUFIGER PRÜFUNGSBERICHT

(Artikel 36 und Regel 70 PCT)

Aktenzeichen des Anmelders oder Anwalts LEA33628-WO Kri	WEITERES VORGEHEN siehe Mitteilung über die Übersendung des internationalen vorläufigen Prüfungsberichts (Formblatt PCT/IPEA/416)	
Internationales Aktenzeichen PCT/EP00/02292	Internationales Anmeldedatum (Tag/Monat/Jahr) 15/03/2000	Prioritätsdatum (Tag/Monat/Tag) 27/03/1999
Internationale Patentklassifikation (IPK) oder nationale Klassifikation und IPK C07D403/10		
Anmelder BAYER AG et al.		



- Dieser internationale vorläufige Prüfungsbericht wurde von der mit der internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde erstellt und wird dem Anmelder gemäß Artikel 36 übermittelt.
- Dieser BERICHT umfaßt insgesamt 5 Blätter einschließlich dieses Deckblatts.

☐ Außerdem liegen dem Bericht ANLAGEN bei; dabei handelt es sich um Blätter mit Beschreibungen, Ansprüchen und/oder Zeichnungen, die geändert wurden und diesem Bericht zugrunde liegen, und/oder Blätter mit vor dieser Behörde vorgenommenen Berichtigungen (siehe Regel 70.16 und Abschnitt 607 der Verwaltungsrichtlinien zum PCT).

 Diese Anlagen umfassen insgesamt Blätter.

3. Dieser Bericht enthält Angaben zu folgenden Punkten:

- I ☒ Grundlage des Berichts
- II ☐ Priorität
- III ☐ Keine Erstellung eines Gutachtens über Neuheit, erfinderische Tätigkeit und gewerbliche Anwendbarkeit
- IV ☐ Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung
- V ☒ Begründete Feststellung nach Artikel 35(2) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung
- VI ☐ Bestimmte angeführte Unterlagen
- VII ☒ Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung
- VIII ☒ Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung

Datum der Einreichung des Antrags 01/08/2000	Datum der Fertigstellung dieses Berichts 25.06.2001
Name und Postanschrift der mit der internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde:  Europäisches Patentamt D-80298 München Tel. +49 89 2399 - 0 Tx: 523656 epmu d Fax: +49 89 2399 - 4465	Bevollmächtigter Bediensteter Seelmann, I Tel. Nr. +49 89 2399 7480 

I. Grundlage des Berichts

1. Hinsichtlich der **Bestandteile** der internationalen Anmeldung (*Ersatzblätter, die dem Anmeldeamt auf eine Aufforderung nach Artikel 14 hin vorgelegt wurden, gelten im Rahmen dieses Berichts als "ursprünglich eingereicht" und sind ihm nicht beigelegt, weil sie keine Änderungen enthalten (Regeln 70.16 und 70.17)*):
Beschreibung, Seiten:

1-145 ursprüngliche Fassung

Patentansprüche, Nr.:

1-10 ursprüngliche Fassung

2. Hinsichtlich der **Sprache**: Alle vorstehend genannten Bestandteile standen der Behörde in der Sprache, in der die internationale Anmeldung eingereicht worden ist, zur Verfügung oder wurden in dieser eingereicht, sofern unter diesem Punkt nichts anderes angegeben ist.

Die Bestandteile standen der Behörde in der Sprache: zur Verfügung bzw. wurden in dieser Sprache eingereicht; dabei handelt es sich um

- ☐ die Sprache der Übersetzung, die für die Zwecke der internationalen Recherche eingereicht worden ist (nach Regel 23.1(b)).
- ☐ die Veröffentlichungssprache der internationalen Anmeldung (nach Regel 48.3(b)).
- ☐ die Sprache der Übersetzung, die für die Zwecke der internationalen vorläufigen Prüfung eingereicht worden ist (nach Regel 55.2 und/oder 55.3).

3. Hinsichtlich der in der internationalen Anmeldung offenbarten **Nucleotid- und/oder Aminosäuresequenz** ist die internationale vorläufige Prüfung auf der Grundlage des Sequenzprotokolls durchgeführt worden, das:

- ☐ in der internationalen Anmeldung in schriftlicher Form enthalten ist.
- ☐ zusammen mit der internationalen Anmeldung in computerlesbarer Form eingereicht worden ist.
- ☐ bei der Behörde nachträglich in schriftlicher Form eingereicht worden ist.
- ☐ bei der Behörde nachträglich in computerlesbarer Form eingereicht worden ist.
- ☐ Die Erklärung, daß das nachträglich eingereichte schriftliche Sequenzprotokoll nicht über den Offenbarungsgehalt der internationalen Anmeldung im Anmeldezeitpunkt hinausgeht, wurde vorgelegt.
- ☐ Die Erklärung, daß die in computerlesbarer Form erfassten Informationen dem schriftlichen Sequenzprotokoll entsprechen, wurde vorgelegt.

4. Aufgrund der Änderungen sind folgende Unterlagen fortgefallen:

- ☐ Beschreibung, Seiten:
- ☐ Ansprüche, Nr.:
- ☐ Zeichnungen, Blatt:

INTERNATIONALER VORLÄUFIGER PRÜFUNGSBERICHT

Internationales Aktenzeichen PCT/EP00/02292

5. ☐ Dieser Bericht ist ohne Berücksichtigung (von einigen) der Änderungen erstellt worden, da diese aus den angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde über den Offenbarungsgehalt in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgehen (Regel 70.2(c)).

(Auf Ersatzblätter, die solche Änderungen enthalten, ist unter Punkt 1 hinzuweisen; sie sind diesem Bericht beizufügen).

6. Etwaige zusätzliche Bemerkungen:

V. Begründete Feststellung nach Artikel 35(2) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung

1. Feststellung

Neuheit (N)	Ja: Ansprüche	4
	Nein: Ansprüche	1-3, 5-10
Erfinderische Tätigkeit (ET)	Ja: Ansprüche	
	Nein: Ansprüche	1-10
Gewerbliche Anwendbarkeit (GA)	Ja: Ansprüche	1-10
	Nein: Ansprüche	

2. Unterlagen und Erklärungen
siehe Beiblatt

VII. Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung

Es wurde festgestellt, daß die internationale Anmeldung nach Form oder Inhalt folgende Mängel aufweist:
siehe Beiblatt

VIII. Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung

Zur Klarheit der Patentansprüche, der Beschreibung und der Zeichnungen oder zu der Frage, ob die Ansprüche in vollem Umfang durch die Beschreibung gestützt werden, ist folgendes zu bemerken:
siehe Beiblatt

Zu Punkt V

Begründete Feststellung nach Regel 66.2(a)(ii) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung

Die vorliegende Anmeldung erfüllt nicht die Erfordernisse des Artikels 33 (2) PCT, da ein Teil der im unabhängigen Anspruch 1 beanspruchten Verbindungen bereits aus D1 und D2 bekannt ist. Der Anspruchsgegenstand kann auch nicht als neue Auswahl gegenüber dem Stand der Technik angesehen werden. Die allgemeine Formel I in Anspruch 1 von D1 überlappt mit der gegenwärtigen Formel (I) außerdem fallen viele Verbindungen der Tabelle A (vgl. Seiten 26-31 und 45-47) von D1 ebenfalls unter die Formel (I) der Anmeldung. Das gleiche gilt für die allgemeine Strukturformel in Anspruch 1 von D2. Sie überschneidet sich mit der gegenwärtigen Formel (I), außerdem fallen die meisten Verbindungen der Tabelle 1 (vgl. Seiten 11-20) von D2 unter die Formel (I) der Anmeldung. Die Ansprüche 2, 3, 5 und 7 bis 10 sind ebenfalls von D1 und D2 und Anspruch 6 nur von D1 neuheitsschädlich getroffen (für Anspruch 7 vgl. u.a. Anspruch 6 von D1 und D2, Seite 30). Darüber hinaus überlappen auch die Anspruchsgegenstände von D3, D4 und D5 mit den gegenwärtigen Ansprüchen.

Der Gegenstand des Anspruchs 4 scheint neu zu sein.

Die Beurteilung der erfinderischen Tätigkeit bezieht sich nur auf Verbindungen für die Neuheit anerkannt werden kann. Den nächstliegenden Stand der Technik bilden die Dokumente D1 und D2. Die beschriebenen Verbindungen haben qualitativ die gleiche Wirkung wie die gegenwärtig beanspruchten. Aus den Dokumenten D3 bis D5 sind weitere relevante Benzoylpyrazol-Derivate mit herbiziden Eigenschaften bekannt. Als Aufgabe der vorliegenden Erfindung kann nicht das zur Verfügung stellen weiterer herbizid wirksamer Benzoylpyrazol-Derivate gesehen werden, da die Lösung für den Fachmann in Hinblick auf D1 und D2 offensichtlich wäre.

Die der Anmeldung zugrundeliegende Aufgabe muß daher unter dem Aspekt neuer Derivate, die unerwartete oder überraschende Eigenschaften gegenüber dem nächsten Stand der Technik (D1 und D2) aufweisen, gesehen werden. Ohne vergleichende Testergebnisse, kann nicht beurteilt werden, ob die Erfindung die Erfordernisse des Artikels 33(3) PCT erfüllt.

Zu Punkt VII

Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung

Um die Erfordernisse der Regel 5.1 a) ii) PCT zu erfüllen, sollte in der Beschreibung das Dokument D2 genannt werden.

Zu Punkt VIII

Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung

Die Definition von Z in Anspruch 1 spricht von 1 - 4 Heteroatomen, in der Klammer werden bis zu 4 N-Atome und gegebenenfalls "additiv" (eine Möglichkeit) ein O- oder S-Atom genannt. Es ergibt sich die Möglichkeit von mehr als 4 Heteroatomen, anderenfalls würde die Bezeichnung "alternativ" ausreichen (Artikel 6 PCT).

Anspruch 7. c) scheint nicht klar bzw. die Reaktion nicht ausführbar zu sein. Um das Zielmolekül zu erhalten, müßte H₂ abgespalten werden. Gemäß Seite 54 der Beschreibung sollte statt H-Y (wie in Anspruch 7) ein Cl-Y eingesetzt werden (Artikel 5 und 6 PCT).

Der Gegenstand des Anspruchs 8 ist durch Y = H in Anspruch 1 bereits explizit genannt, der Anspruch 8 erscheint daher überflüssig zu sein.

Da Q in Anspruch 1 nicht definiert ist, erscheint der Bezug in Anspruch 5 sinnlos.

Translation
09/937631
10261

PATENT COOPERATION TREATY

PCT

INTERNATIONAL PRELIMINARY EXAMINATION REPORT

(PCT Article 36 and Rule 70)

TECH CENTER 1600/2900

MAR 11 2002

RECEIVED

Applicant's or agent's file reference LEA33628-WO	FOR FURTHER ACTION See Notification of Transmittal of International Preliminary Examination Report (Form PCT/IPEA/416)	
International application No. PCT/EP00/02292	International filing date (day/month/year) 15 March 2000 (15.03.00)	Priority date (day/month/year) 27 March 1999 (27.03.99)
International Patent Classification (IPC) or national classification and IPC C07D 403/10, A01N 43/653, 43/56, C07D 401/10, 417/10, 471/04, 231/20, 413/10, 487/04		
Applicant BAYER AKTIENGESELLSCHAFT		

<p>1. This international preliminary examination report has been prepared by this International Preliminary Examining Authority and is transmitted to the applicant according to Article 36.</p> <p>2. This REPORT consists of a total of <u>5</u> sheets, including this cover sheet.</p> <p><input type="checkbox"/> This report is also accompanied by ANNEXES, i.e., sheets of the description, claims and/or drawings which have been amended and are the basis for this report and/or sheets containing rectifications made before this Authority (see Rule 70.16 and Section 607 of the Administrative Instructions under the PCT).</p> <p>These annexes consist of a total of _____ sheets.</p>
<p>3. This report contains indications relating to the following items:</p> <p>I <input checked="" type="checkbox"/> Basis of the report</p> <p>II <input type="checkbox"/> Priority</p> <p>III <input type="checkbox"/> Non-establishment of opinion with regard to novelty, inventive step and industrial applicability</p> <p>IV <input type="checkbox"/> Lack of unity of invention</p> <p>V <input checked="" type="checkbox"/> Reasoned statement under Article 35(2) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement</p> <p>VI <input type="checkbox"/> Certain documents cited</p> <p>VII <input checked="" type="checkbox"/> Certain defects in the international application</p> <p>VIII <input checked="" type="checkbox"/> Certain observations on the international application</p>

Date of submission of the demand 01 August 2000 (01.08.00)	Date of completion of this report 25 June 2001 (25.06.2001)
Name and mailing address of the IPEA/EP	Authorized officer
Facsimile No.	Telephone No.

INTERNATIONAL PRELIMINARY EXAMINATION REPORT

International application No.

PCT/EP00/02292

I. Basis of the report

1. This report has been drawn on the basis of (*Replacement sheets which have been furnished to the receiving Office in response to an invitation under Article 14 are referred to in this report as "originally filed" and are not annexed to the report since they do not contain amendments.*):

☐ the international application as originally filed.

☒ the description, pages 1-145, as originally filed,
pages _____, filed with the demand,
pages _____, filed with the letter of _____,
pages _____, filed with the letter of _____.

☒ the claims, Nos. 1-10, as originally filed,
Nos. _____, as amended under Article 19,
Nos. _____, filed with the demand,
Nos. _____, filed with the letter of _____,
Nos. _____, filed with the letter of _____.

☐ the drawings, sheets/fig _____, as originally filed,
sheets/fig _____, filed with the demand,
sheets/fig _____, filed with the letter of _____,
sheets/fig _____, filed with the letter of _____.

2. The amendments have resulted in the cancellation of:

☐ the description, pages _____

☐ the claims, Nos. _____

☐ the drawings, sheets/fig _____

3. ☐ This report has been established as if (some of) the amendments had not been made, since they have been considered to go beyond the disclosure as filed, as indicated in the Supplemental Box (Rule 70.2(c)).

4. Additional observations, if necessary:

INTERNATIONAL PRELIMINARY EXAMINATION REPORT

International application No.
PCT/EP 00/02292

V. Reasoned statement under Article 35(2) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement

1. Statement

Novelty (N)	Claims	4	YES
	Claims	1-3, 5-10	NO
Inventive step (IS)	Claims		YES
	Claims	1-10	NO
Industrial applicability (IA)	Claims	1-10	YES
	Claims		NO

2. Citations and explanations

The application fails to meet the requirement of PCT Article 33(2) because some of the compounds defined in Claim 1 are already known from documents D1 and D2. The claimed subject matter cannot be regarded as a novel selection compared with the prior art. There is an overlap between general formula (I) in D1 and general formula (I) in Claim 1 of the present application, and moreover many of the compounds specified in Table A in D1 (pages 26-31 and 45-47) are covered by formula (I) in the present application. The same applies to the general structural formula in Claim 1 of D2, which overlaps with formula (I) in the present application. Moreover, most of the compounds specified in Table 1 in D2 (pages 11-20) are covered by formula (I) in the present application. Claims 2, 3, 5 and 7-10 are also anticipated by both D1 and D2, and Claim 6 is anticipated by D1. For Claim 7, see (for example) Claim 6 in D1 and D2, page 30. The subject matter defined in the claims in documents D3, D4 and D5 also overlaps with that of the present claims.

The subject matter of Claim 4 appears to be novel.

The assessment of inventive step can only apply to compounds that may be considered novel. The closest prior art is found in D1 and D2, which describe compounds that have the same

effect in qualitative terms as those claimed in the present application. Documents D3 to D5 also describe other relevant benzoylpyrazol derivatives with herbicidal properties. The problem addressed by the present invention cannot be regarded as that of providing further herbicidally active benzoylpyrazol derivatives because the solution is obvious to a person skilled in the art in the light of D1 and D2.

The problem addressed by the invention must therefore be regarded as that of providing novel derivatives which have unexpected or surprising properties compared with the closest prior art (D1 and D2). Without the results of comparative tests, it is not possible to assess whether the invention meets the requirement of PCT Article 33(3).

INTERNATIONAL PRELIMINARY EXAMINATION REPORT

International application No.

PCT/EP 00/02292

VII. Certain defects in the international application

The following defects in the form or contents of the international application have been noted:

In order to meet the requirements of PCT Rule 5.1(a)(ii),
the description should cite document D2.

VIII. Certain observations on the international application

The following observations on the clarity of the claims, description, and drawings or on the question whether the claims are fully supported by the description, are made:

The definition of Z in Claim 1 refers to 1-4 heteroatoms, and then in parentheses specifies up to 4 nitrogen atoms with the optional "addition" (one possibility) of 1 oxygen or 1 sulphur atom. This implies that it is possible to have more than 4 heteroatoms; if this is not the case, the stipulation "alternatively" would suffice (PCT Article 6).

Step (c) in Claim 7 is unclear because the reaction does not seem viable. To obtain the target molecule, H₂ would have to be separated. According to page 54 of the description, the compound should include a Cl-Y group instead of an H-Y group as specified in Claim 7 (PCT Articles 5 and 6).

The subject matter of Claim 8 is already explicitly stated in Claim 1, which indicates that Y can be hydrogen. Claim 8 therefore appears to be redundant.

Since Q is not specified in Claim 1, the reference in Claim 5 seems meaningless.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

In Application No

PCT/EP 98/04481

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CHEMICAL ABSTRACTS, vol. 076, no. 15, 1972 Columbus, Ohio, US; abstract no. 085658, SAMULA K: "Condensation of acetylbenzene derivatives with pyridine aldehydes" page 405; column 1; XP002088291 see abstract & ROCZ. CHEM. (ROCHAC);71; VOL.45 (11); PP.1833-40, Inst. Farm.:Warsaw; Pol. ---	7
X	MIYANO S ET AL: "Nucleophilic addition of phenols to N-(2-pyridylmethylene)aniline" TETRAHEDRON LETT. (TELEAY);70; (22); PP.1909-12, XP002088290 Fukuoka Univ.:Dep. Pharm. Sci.: Fukuoka; Japan see page 1911; table I ---	7
X	WO 96 26206 A (BASF AG ;DEYN WOLFGANG VON (DE); HILL REGINA LUISE (DE); KARDORFF) 29 August 1996 see abstract; claims 1-3,5,6 see page 39 - page 40; table 5 ---	1-11
X	EP 0 282 944 A (NISSAN CHEMICAL IND LTD) 21 September 1988 cited in the application see page 293 - page 295; claim 1 see page 296, line 25 - line 35; claim 2 see page 39; example 31; table 3 -----	1-11

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/EP 98/04481

Box I Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 1 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:
2. ☒ Claims Nos.: non applicable
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

See the addendum ADDITIONAL MATTER PCT/ISA/210
3. ☐ Claims Nos.:
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box II Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 2 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fee, this Authority did not invite payment of any additional fee.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest.
☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

Claim No: non applicable

The search rests on so large a number of particularly relevant documents related to the subject of Claim 7 (intermediary products in the production of compounds according to Claim 1), especially from the point of view of novelty, that the completion of a comprehensive European search report is impossible. The aforementioned documents should be regarded as documents selected from among those which were found, especially with regard to their significance as to the subject exemplified in the present application.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No

Information on patent family members

PCT/EP 98/04481

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
FR 2053017	A	16-04-1971	CA 926409 A	15-05-1973
			CH 537894 A	31-07-1973
			GB 1272190 A	26-04-1972
			NL 7008622 A	29-12-1970
			US 3655693 A	11-04-1972
WO 9626206	A	29-08-1996	AU 4665596 A	11-09-1996
			BG 101825 A	30-04-1998
			BR 9607333 A	25-11-1997
			CA 2210693 A	29-08-1996
			CN 1175951 A	11-03-1998
			CZ 9702473 A	13-05-1998
			EP 0811007 A	10-12-1997
			FI 973471 A	22-08-1997
			HU 9800725 A	28-07-1998
			LT 97145 A, B	26-01-1998
			LV 11895 A	20-12-1997
			LV 11895 B	20-03-1998
			NO 973861 A	22-10-1997
			PL 322277 A	19-01-1998
EP 0282944	A	21-09-1988	AT 142624 T	15-09-1996
			AU 599468 B	19-07-1990
			AU 1309988 A	15-09-1988
			CA 1328260 A	05-04-1994
			CN 1023011 B	08-12-1993
			DE 3855518 D	17-10-1996
			DE 3855518 T	20-02-1997
			DK 146488 A	18-09-1988
			ES 2094719 T	01-02-1997
			GR 3021596 T	28-02-1997
			JP 2000173 A	05-01-1990
			JP 2725274 B	11-03-1998
			JP 10095702 A	14-04-1998
			KR 9604862 B	16-04-1996
			SU 1836018 A	23-08-1993
			RU 2055836 C	10-03-1996
			US 4948887 A	14-08-1990
			US 5175299 A	29-12-1992
			RO 105806 A	30-12-1992
			US 4885022 A	05-12-1989

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

IPK 6 C07D401/10 A01N43/56 A01N43/74 A01N43/08 A01N43/40
C07D405/10 C07D213/30 C07D307/42 C07D307/58 C07D413/10
C07D261/08

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

IPK 6 C07D A01N

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr
X	FR 2 053 017 A (MERCK AND CO., INC.) 21. Mai 1971 siehe Seite 1 siehe Seite 10 - Seite 22: Beispiele ---	7
X	BOHLMANN F ET AL: "Synthesis of naturally occurring hydroxyacetophenone derivatives" CHEM. BER. (CHBEAM);72: VOL.105 (3); PP.863-73, XP002088289 Tech. Univ. Berlin;Org.-Chem. Inst.; Berlin; Ger. siehe Seite 864: Beispiel 9 --- -/--	7



Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen



Siehe Anhang Patentfamilie

Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen

"A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist

"E" älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist

"L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)

"O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht

"P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

"T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

"X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfindenscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden

"Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfindenscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

"&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

16. Dezember 1998

Absenddatum des internationalen Recherchenberichts

12/01/1999

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde
Europäisches Patentamt, P. B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl.
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

Paisdor, B

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	CHEMICAL ABSTRACTS, vol. 076, no. 15, 1972 Columbus, Ohio, US; abstract no. 085658, SAMULA K: "Condensation of acetylbenzene derivatives with pyridine aldehydes" Seite 405; Spalte 1; XP002088291 siehe Zusammenfassung & ROCZ. CHEM. (ROCHAC);71; VOL.45 (11); PP.1833-40, Inst. Farm.;Warsaw; Pol. ---	7
X	MIYANO S ET AL: "Nucleophilic addition of phenols to N-(2-pyridylmethylene)aniline" TETRAHEDRON LETT. (TELEAY);70; (22); PP.1909-12, XP002088290 Fukuoka Univ.;Dep. Pharm. Sci.; Fukuoka; Japan siehe Seite 1911; Tabelle I ---	7
X	WO 96 26206 A (BASF AG ;DEYN WOLFGANG VON (DE); HILL REGINA LUISE (DE); KARDORFF) 29. August 1996 siehe Zusammenfassung; Ansprüche 1-3,5,6 siehe Seite 39 - Seite 40; Tabelle 5 ---	1-11
X	EP 0 282 944 A (NISSAN CHEMICAL IND LTD) 21. September 1988 in der Anmeldung erwähnt siehe Seite 293 - Seite 295; Anspruch 1 siehe Seite 296. Zeile 25 - Zeile 35: Anspruch 2 siehe Seite 39; Beispiel 31; Tabelle 3 -----	1-11

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

internationales Aktenzeichen

PCT/EP 98/ 04481

Feld I Bemerkungen zu den Ansprüchen, die sich als nicht recherchierbar erwiesen haben (Fortsetzung von Punkt 1 auf Blatt 1)

Gemäß Artikel 17(2)a) wurde aus folgenden Gründen für bestimmte Ansprüche kein Recherchenbericht erstellt:

1. ☐ Ansprüche Nr. weil Sie sich auf Gegenstände beziehen, zu deren Recherche die Behörde nicht verpflichtet ist, nämlich
2. ☒ Ansprüche Nr. nicht anwendbar
weil sie sich auf Teile der internationalen Anmeldung beziehen, die den vorgeschriebenen Anforderungen so wenig entsprechen, daß eine sinnvolle internationale Recherche nicht durchgeführt werden kann, nämlich
siehe Zusatzblatt WEITERE ANGABEN PCT/ISA/210
3. ☐ Ansprüche Nr. weil es sich dabei um abhängige Ansprüche handelt, die nicht entsprechend Satz 2 und 3 der Regel 6.4 a) abgefaßt sind.

Feld II Bemerkungen bei mangelnder Einheitlichkeit der Erfindung (Fortsetzung von Punkt 2 auf Blatt 1)

Die internationale Recherchenbehörde hat festgestellt, daß diese internationale Anmeldung mehrere Erfindungen enthält:

1. ☐ Da der Anmelder alle erforderlichen zusätzlichen Recherchegebühren rechtzeitig entrichtet hat, erstreckt sich dieser internationale Recherchenbericht auf alle recherchierbaren Ansprüche der internationalen Anmeldung
2. ☐ Da für alle recherchierbaren Ansprüche die Recherche ohne einen Arbeitsaufwand durchgeführt werden konnte, der eine zusätzliche Recherchegebühr gerechtfertigt hätte, hat die Internationale Recherchenbehörde nicht zur Zahlung einer solchen Gebühr aufgefordert.
3. ☐ Da der Anmelder nur einige der erforderlichen zusätzlichen Recherchegebühren rechtzeitig entrichtet hat, erstreckt sich dieser internationale Recherchenbericht nur auf die Ansprüche der internationalen Anmeldung, für die Gebühren entrichtet worden sind, nämlich auf die Ansprüche Nr.
4. ☐ Der Anmelder hat die erforderlichen zusätzlichen Recherchegebühren nicht rechtzeitig entrichtet. Der internationale Recherchenbericht beschränkt sich daher auf die in den Ansprüchen zuerst erwähnte Erfindung; diese ist in folgenden Ansprüchen erfaßt:

Bemerkungen hinsichtlich eines Widerspruchs

- ☐ Die zusätzlichen Gebühren wurden vom Anmelder unter Widerspruch gezahlt.
- ☐ Die Zahlung zusätzlicher Gebühren erfolgte ohne Widerspruch.

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen PCT/EP 98 04481

WEITERE ANGABEN

PCT/ISA/ 210

Ansprüche Nr.: nicht anwendbar

Die Recherche hat eine so große Anzahl besonders relevanter Dokumente für den Gegenstand des Anspruches 7 (Zwischenprodukte in der Herstellung der Verbindungen von Anspruch 1), speziell im Hinblick auf die Neuheit, offenbart, daß die Erstellung eines vollständigen Europäischen Recherchenberichtes nicht möglich ist. Die zitierten Dokumente sind als Auswahl aus den gefundenen Dokumenten anzusehen, insbesondere unter Berücksichtigung ihrer Bedeutung im Hinblick auf den durch die Beispiele veranschaulichten Gegenstand der vorliegenden Anmeldung.

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

In. des Aktenzeichen

PCT/EP 98/04481

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument		Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung	
FR 2053017	A	16-04-1971	CA	926409 A	15-05-1973
			CH	537894 A	31-07-1973
			GB	1272190 A	26-04-1972
			NL	7008622 A	29-12-1970
			US	3655693 A	11-04-1972

WO 9626206	A	29-08-1996	AU	4665596 A	11-09-1996
			BG	101825 A	30-04-1998
			BR	9607333 A	25-11-1997
			CA	2210693 A	29-08-1996
			CN	1175951 A	11-03-1998
			CZ	9702473 A	13-05-1998
			EP	0811007 A	10-12-1997
			FI	973471 A	22-08-1997
			HU	9800725 A	28-07-1998
			LT	97145 A, B	26-01-1998
			LV	11895 A	20-12-1997
			LV	11895 B	20-03-1998
			NO	973861 A	22-10-1997
			PL	322277 A	19-01-1998

EP 0282944	A	21-09-1988	AT	142624 T	15-09-1996
			AU	599468 B	19-07-1990
			AU	1309988 A	15-09-1988
			CA	1328260 A	05-04-1994
			CN	1023011 B	08-12-1993
			DE	3855518 D	17-10-1996
			DE	3855518 T	20-02-1997
			DK	146488 A	18-09-1988
			ES	2094719 T	01-02-1997
			GR	3021596 T	28-02-1997
			JP	2000173 A	05-01-1990
			JP	2725274 B	11-03-1998
			JP	10095702 A	14-04-1998
			KR	9604862 B	16-04-1996
			SU	1836018 A	23-08-1993
			RU	2055836 C	10-03-1996
			US	4948887 A	14-08-1990
			US	5175299 A	29-12-1992
			RO	105806 A	30-12-1992
			US	4885022 A	05-12-1989

09/937-631

PCT

WELTORGANISATION FÜR GEISTIGES EIGENTUM
Internationales BüroINTERNATIONALE ANMELDUNG VERÖFFENTLICHT NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE
INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT)(51) Internationale Patentklassifikation ⁷ :C07D 403/10, A01N 43/653, 43/56, C07D
401/10, 417/10, 471/04, 231/20, 413/10,
487/04

A1

(11) Internationale Veröffentlichungsnummer: WO 00/58306

(43) Internationales
Veröffentlichungsdatum:

5. Oktober 2000 (05.10.00)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP00/02292

(22) Internationales Anmeldedatum: 15. März 2000 (15.03.00)

(30) Prioritätsdaten:

199 14 140.1 27. März 1999 (27.03.99) DE

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten ausser US): BAYER
AKTIENGESELLSCHAFT [DE/DE]; D-51368 Leverkusen
(DE).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): MÜLLER, Klaus-Helmut
[AT/DE]; Solfstr. 19, D-40593 Düsseldorf (DE). LEHR,
Stefan [DE/DE]; Ricarda-Huch-Str. 38, D-40764 Lan-
genfeld (DE). SCHALLNER, Otto [DE/DE]; Noldeweg
22, D-40789 Monheim (DE). SCHWARZ, Hans-Georg
[DE/DE]; Stettiner Str. 7 a, D-40764 Langenfeld (DE).
WROBLOWSKY, Heinz-Jürgen [DE/DE]; Virneburgstr.
73, D-40764 Langenfeld (DE). DREWES, Mark, Wilhelm
[DE/DE]; Goethestr. 38, D-40764 Langenfeld (DE).
FEUCHT, Dieter [DE/DE]; Ackerweg 9, D-40789 Mon-
heim (DE). PONTZEN, Rolf [DE/DE]; Am Kloster 69,
D-42799 Leichlingen (DE). WETCHOLOWSKY, Ingo[DE/BR]; Cond. Estancia Marambaia, Rua Avare, 500,
CEP-13280-000 Vinhedo, SP (BR).(74) Gemeinsamer Vertreter: BAYER AKTIENGE-
SELLSCHAFT; D-51368 Leverkusen (DE).(81) Bestimmungsstaaten: AE, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB,
BG, BR, BY, CA, CH, CN, CR, CU, DE, DK, DM, DZ,
EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS,
JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV,
MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO,
RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA,
UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZW, ARIPO Patent (GH, GM,
KE, LS, MW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZW), eurasisches Patent
(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches
Patent (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR,
IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI Patent (BF, BJ, CF,
CG, CI, CM, GA, GN, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht

Mit internationalem Recherchenbericht.

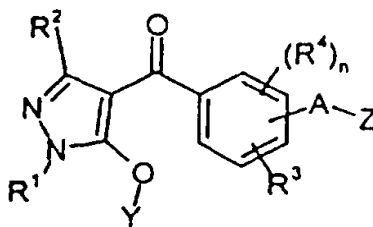
Vor Ablauf der für Änderungen der Ansprüche zugelassenen
Frist; Veröffentlichung wird wiederholt falls Änderungen
eintreffen.

(54) Title: SUBSTITUTED BENZOYLPYRAZOLES AS HERBICIDES

(54) Bezeichnung: SUBSTITUIERTE BENZOYLPYRAZOLE ALS HERBIZIDE

(57) Abstract

The invention relates to novel substituted benzoylpyrazoles of the general formula (I), in which Z is a possibly substituted 4 to 12-membered, saturated or unsaturated, monocyclic or bicyclic heterocyclic grouping which contains between 1 and 4 heteroatoms (up to 4 nitrogen atoms and possibly, either in addition or alternatively, an oxygen atom or a sulphur atom or an SO grouping or an SO₂ grouping) and in addition contains between one and three oxo-groups (C=O) and/or thioxo-groups (C=S) as components of the heterocyclic compound. The invention also relates to a method of producing said benzoylpyrazoles and to their use as herbicides.



(I)

(57) Zusammenfassung

Die Erfindung betrifft neue substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I), in welcher Z für eine gegebenenfalls substituierte 4- bis 12-gliedrige, gesättigte oder ungesättigte, monocyclische oder bicyclische, heterocyclische Gruppierung steht, welche 1 bis 4 Heteroatome (bis zu 4 Stickstoffatome und gegebenenfalls – alternativ oder additiv – ein Sauerstoffatom oder ein Schwefelatom, oder eine SO-Gruppierung oder eine SO₂-Gruppierung) enthält, und welche zusätzlich ein bis drei Oxo-Gruppen (C=O) und/oder Thioxo-Gruppen (C=S) als Bestandteile des Heterocyclus enthält, sowie Verfahren zu ihrer Herstellung und ihre Verwendung als Herbizide.

LEDIGLICH ZUR INFORMATION

Codes zur Identifizierung von PCT-Vertragsstaaten auf den Kopfbögen der Schriften, die internationale Anmeldungen gemäss dem PCT veröffentlichen.

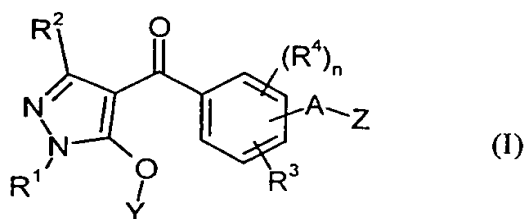
AL	Albanien	ES	Spanien	LS	Lesotho	SI	Slowenien
AM	Armenien	FI	Finnland	LT	Litauen	SK	Slowakei
AT	Österreich	FR	Frankreich	LU	Luxemburg	SN	Senegal
AU	Australien	GA	Gabun	LV	Lettland	SZ	Swasiland
AZ	Aserbaidshan	GB	Vereinigtes Königreich	MC	Monaco	TD	Tschad
BA	Bosnien-Herzegowina	GE	Georgien	MD	Republik Moldau	TG	Togo
BB	Barbados	GH	Ghana	MG	Madagaskar	TJ	Tadschikistan
BE	Belgien	GN	Guinea	MK	Die ehemalige jugoslawische Republik Mazedonien	TM	Turkmenistan
BF	Burkina Faso	GR	Griechenland	ML	Mali	TR	Türkei
BG	Bulgarien	HU	Ungarn	MN	Mongolei	TT	Trinidad und Tobago
BJ	Benin	IE	Irland	MR	Mauretanien	UA	Ukraine
BR	Brasilien	IL	Israel	MW	Malawi	UG	Uganda
BY	Belarus	IS	Island	MX	Mexiko	US	Vereinigte Staaten von Amerika
CA	Kanada	IT	Italien	NE	Niger	UZ	Usbekistan
CF	Zentralafrikanische Republik	JP	Japan	NL	Niederlande	VN	Vietnam
CG	Kongo	KE	Kenia	NO	Norwegen	YU	Jugoslawien
CH	Schweiz	KG	Kirgisistan	NZ	Neuseeland	ZW	Zimbabwe
CI	Côte d'Ivoire	KP	Demokratische Volksrepublik Korea	PL	Polen		
CM	Kamerun	KR	Republik Korea	PT	Portugal		
CN	China	KZ	Kasachstan	RO	Rumänien		
CU	Kuba	LC	St. Lucia	RU	Russische Föderation		
CZ	Tschechische Republik	LI	Liechtenstein	SD	Sudan		
DE	Deutschland	LK	Sri Lanka	SE	Schweden		
DK	Dänemark	LR	Liberia	SG	Singapur		
EE	Estland						

SUBSTITUIERTE BENZOYLPYRAZOLE ALS HERBIZIDE

Die Erfindung betrifft neue substituierte Benzoylpyrazole, Verfahren zu ihrer Herstellung und ihre Verwendung als Herbizide.

Es ist bereits bekannt, dass bestimmte substituierte Benzoylpyrazole herbizide Eigenschaften aufweisen (vgl. EP-A-352543, WO-A-96/26206, WO-A-97/35850, WO-A-97/41105, WO-A-97/41116, WO-A-97/41117, WO-A-97/41118, WO-A-97/46530, WO-A-98/28981, WO-A-98/31681, WO-A-98/31682, WO-A-99/07697). Die Wirkung dieser Verbindungen ist jedoch nicht in allen Belangen zufriedenstellend.

Es wurden nun die neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I),



in welcher

n für die Zahlen 0, 1, 2 oder 3 steht,

A für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) steht,

R¹ für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkenyl, Alkynyl oder Cycloalkyl steht,

R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkoxy-carbonyl oder Cycloalkyl steht.

5 R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

10 R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

15 Y für Wasserstoff oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxycarbonyl, Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl, Dialkylaminocarbonyl, Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkenylsulfonyl, Alkinyl, Alkinylcarbonyl, Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl, Cycloalkylalkyl, Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenylalkyl oder Phenylcarbonylalkyl steht, und

20 Z für eine gegebenenfalls substituierte 4- bis 12-gliedrige, gesättigte oder ungesättigte, monocyclische oder bicyclische, heterocyclische Gruppierung steht, welche 1 bis 4 Heteroatome (bis zu 4 Stickstoffatome und gegebenenfalls - alternativ oder additiv - ein Sauerstoffatom oder ein Schwefelatom, oder eine SO-Gruppierung oder eine SO₂-Gruppierung) enthält, und welche zusätzlich ein bis drei Oxo-Gruppen (C=O) und/oder Thioxo-Gruppen (C=S) als Bestandteile des Heterocyclus enthält,

25 - einschließlich aller möglichen tautomeren Formen der Verbindungen der allgemeinen Formel (I) und der möglichen Salze der Verbindungen der allgemeinen Formel (I) - gefunden.

30 In den Definitionen sind die Kohlenwasserstoffketten, wie Alkyl oder Alkandiyl - auch in Verbindung mit Heteroatomen, wie in Alkoxy - jeweils geradkettig oder verzweigt.

n steht bevorzugt für die Zahlen 0, 1 oder 2.

A steht bevorzugt für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen.

5

R¹ steht bevorzugt für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkyl-carbonyl, C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Alkenyl oder Alkynyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen.

15

R² steht bevorzugt für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy oder Alkoxy-carbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylthio mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen.

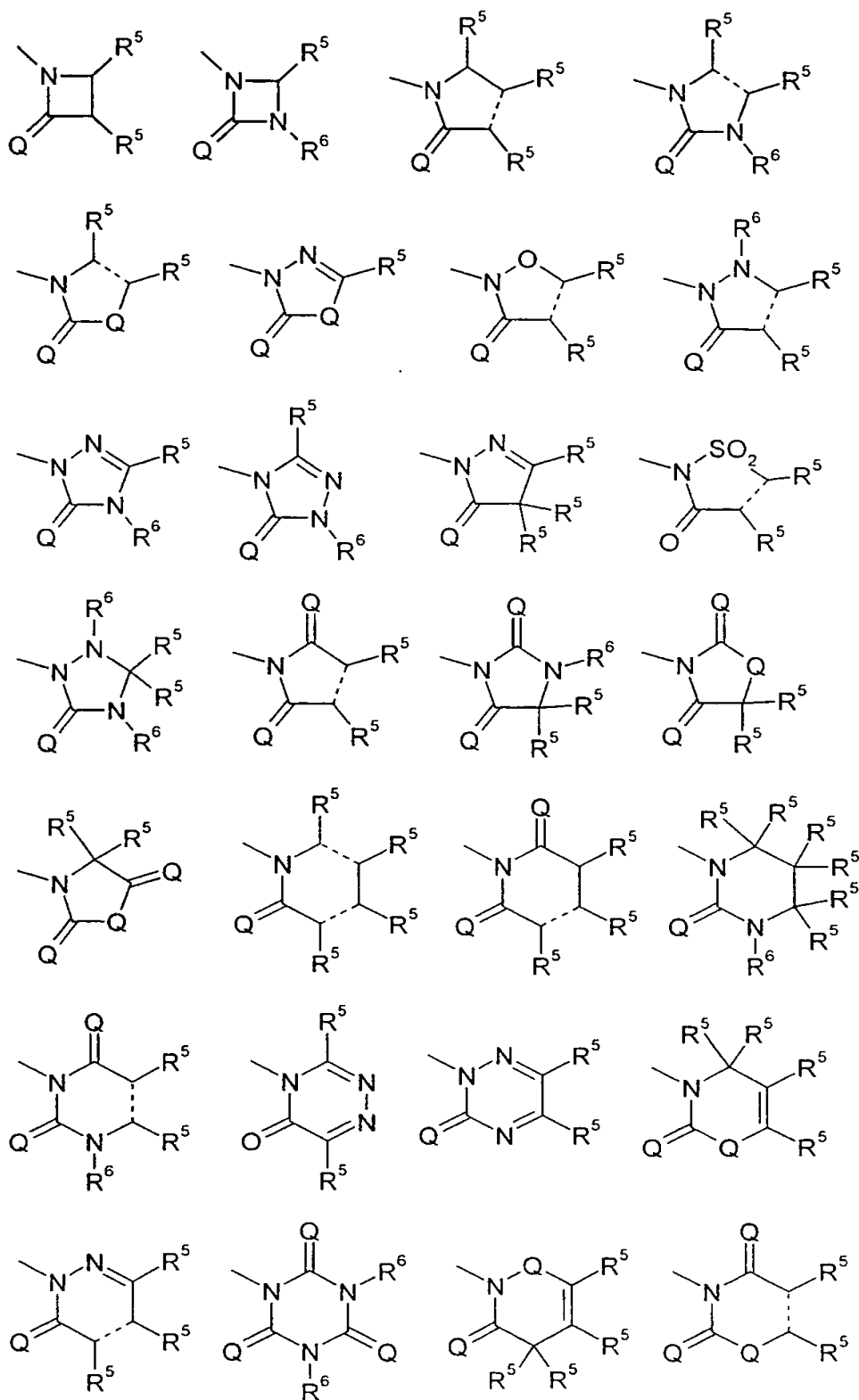
20

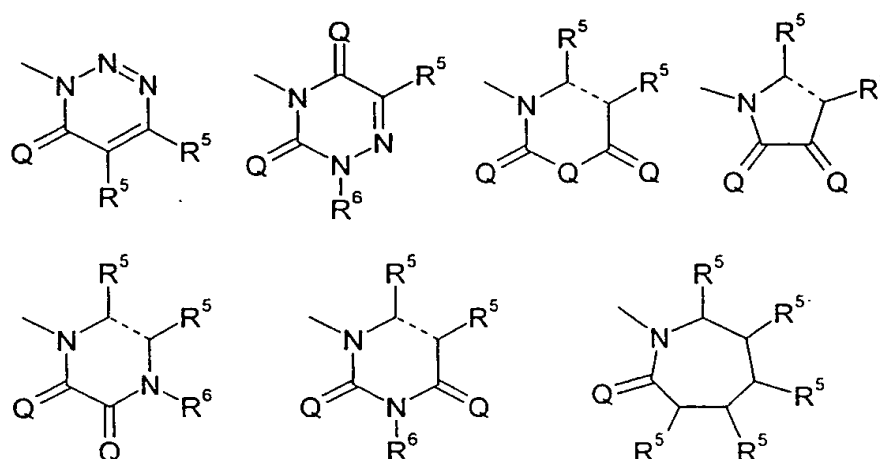
R³ steht bevorzugt für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkyl-amino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen.

25

30

- R⁴ steht bevorzugt für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen.
- Y steht bevorzugt für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl oder Alkoxycarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl oder Dialkylaminocarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkinyl oder Alkinylcarbonyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenylsulfonyl mit bis zu 6 Kohlenstoffatomen für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl oder Cycloalkylalkyl mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls 1 bis 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder C₁-C₄-Halogenalkoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenyl-C₁-C₄-alkyl oder Phenylcarbonyl-C₁-C₄-alkyl.
- Z steht bevorzugt für eine der nachstehenden heterocyclischen Gruppierungen





5 worin jeweils die gestrichelt gezeichnete Bindung eine Einfachbindung oder eine Doppelbindung ist,

Q für Sauerstoff oder Schwefel steht,

10 R⁵ für Wasserstoff, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für Propadienylthio, für jeweils gegebenenfalls

15 durch Halogen substituiertes Alkylamino oder Dialkylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkinyl, Alkenyloxy, Alkenylthio oder Alkenylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkinylgruppen, für jeweils

20 gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkyloxy, Cycloalkylthio, Cycloalkylamino, Cycloalkylalkyl, Cycloalkylalkoxy, Cycloalkylalkylthio oder Cycloalkylalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls bis zu 4 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, für jeweils gegebenen-

5 falls durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Phenyl, Phenyloxy, Phenylthio, Phenylamino, Benzyl, Benzyloxy, Benzylthio oder Benzylamino steht, für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino steht, oder - für den Fall, dass zwei benachbarte Reste R⁵ und R⁵ sich an einer Doppelbindung befinden - zusammen mit dem benachbarten Rest R⁵ auch für eine Benzogruppierung steht, und

10 R⁶ für Wasserstoff, Hydroxy, Amino, Alkylidenamino mit bis zu 4 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylamino, Dialkylamino oder Alkanoylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkinyl oder Alkenyloxy mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkinylgruppen, für jeweils
15 gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylalkyl oder Cycloalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls bis zu 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Phenyl oder Benzyl
20 steht, oder zusammen mit einem benachbarten Rest R⁵ oder R⁶ für gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Alkan-diyl mit 3 bis 5 Kohlenstoffatomen steht,

25 wobei die einzelnen Reste R⁵ und R⁶ - soweit mehrere davon an gleiche heterocyclische Gruppierungen gebunden sind, gleiche oder verschiedene Bedeutungen im Rahmen der obigen Definition haben können.

Q steht bevorzugt für Sauerstoff.

30 R⁵ steht bevorzugt für Wasserstoff, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Iod, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor,

5 Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, n-, i-, s- oder t-Butylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, n-, i-, s- oder t-Butylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, n-, i-, s- oder t-Butylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Di-n-propylamino oder Di-i-propylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Ethenyl, Propenyl, Butenyl, Ethinyl, Propinyl, Butinyl, Propenyloxy, Butenyloxy, Propenylthio, Butenylthio, Propenylamino oder Butenylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropyloxy, Cyclobutyloxy, Cyclopentyloxy, Cyclohexyloxy, Cyclopropylthio, Cyclobutylthio, Cyclopentylthio, Cyclohexylthio, Cyclopropylamino, Cyclobutylamino, Cyclopentylamino, Cyclohexylamino, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl, Cyclohexylmethyl, Cyclopropylmethoxy, Cyclobutylmethoxy, Cyclopentylmethoxy, Cyclohexylmethoxy, Cyclopropylmethylthio, Cyclobutylmethylthio, Cyclopentylmethylthio, Cyclohexylmethylthio, Cyclopropylmethylamino, Cyclobutylmethylamino, Cyclopentylmethylamino oder Cyclohexylmethylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Phenyl, Phenylloxy, Phenylthio, Phenylamino, Benzyl, Benzyloxy, Benzylthio oder Benzylamino, für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino steht, oder - für den Fall, dass zwei benachbarte Reste R⁵ und R⁵ sich an einer Doppelbindung

10

15

20

25

30

befinden - zusammen mit dem benachbarten Rest R^5 auch für eine Benzogruppierung.

- 5 R^6 steht bevorzugt für Wasserstoff, Hydroxy, Amino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i- oder s-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylamino, Ethylamino oder Dimethylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Ethenyl, Propenyl, Ethinyl, Propinyl oder Propenyloxy, für
- 10 jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl, Cyclohexylmethyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Phenyl oder Benzyl steht, oder zusammen mit
- 15 einem benachbarten Rest R^5 oder R^6 für jeweils gegebenenfalls durch Methyl und/oder Ethyl substituiertes Propan-1,3-diyl (Trimethylen), Butan-1,4-diyl (Tetramethylen) oder Pentan-1,5-diyl (Pentamethylen).
- 20 n steht besonders bevorzugt für die Zahlen 0 oder 1.
- A steht besonders bevorzugt für eine Einfachbindung, Methylen, Ethyliden (Ethan-1,1-diyl) oder Dimethylen (Ethan-1,2-diyl).
- 25 R^1 steht besonders bevorzugt für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor
- 30 oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propinyl oder Butinyl, oder für

jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl.

5 R² steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thio-
carbamoyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy
oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-
Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methoxycarbonyl, Ethoxy-
carbonyl, n- oder i-Propoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor
10 und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, oder
für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder
Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl.

15 R³ steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy,
Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, Iod, für jeweils gegebenen-
falls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy,
Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl,
Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-
Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder
Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy,
20 n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor
substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl,
Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder
i-Propylsulfonyl, oder für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino,
Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylamino-
25 sulfonyl.

30 R⁴ steht besonders bevorzugt für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thio-
carbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor
und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio,
n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder
Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-

Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, oder für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylaminosulfonyl.

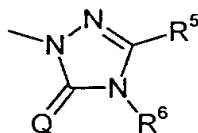
R⁵ steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, Hydroxy, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Difluormethyl, Dichlormethyl, Trifluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Fluordichlormethyl, Fluorethyl, Chlorethyl, Difluorethyl, Dichlorethyl, Fluor-n-propyl, Fluor-i-propyl, Chlor-n-propyl, Chlor-i-propyl, Methoxymethyl, Ethoxymethyl, Methoxyethyl, Ethoxyethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Fluorethoxy, Chlorethoxy, Difluorethoxy, Dichlorethoxy, Trifluorethoxy, Trichlorethoxy, Chlorfluorethoxy, Chlordifluorethoxy, Fluordichlorethoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Fluorethylthio, Chlorethylthio, Difluorethylthio, Dichlorethylthio, Chlorfluorethylthio, Chlordifluorethylthio, Fluordichlorethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, Dimethylamino, Propenylthio, Butenylthio, Propinylthio, Butinylthio, Cyclopropyl, Cyclopropylmethyl, Cyclopropylmethoxy, Phenyl oder Phenoxy.

R⁶ steht besonders bevorzugt für Amino, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, Methylamino, Dimethylamino. Cyclopropyl oder Cyclopropylmethyl steht, oder zusammen mit R⁵ für Propan-1,3-diyl (Trimethylen), Butan-1,4-diyl (Tetramethylen) oder Pentan-1,5-diyl (Pentamethylen).

Y steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, Acetyl, Propionyl, n- oder i-Butyryl, Methoxycarbonyl oder Ethoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor und/oder Brom substituiertes Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, n-, i-, s- oder t-Butylsulfonyl, Methylaminocarbonyl, Ethylaminocarbonyl, n- oder i-Propylaminocarbonyl, Dimethylaminocarbonyl oder Diethylaminocarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propenylcarbonyl, Butenylcarbonyl, Propenylsulfonyl, Butenylsulfonyl, Propinyl, Butinyl, Propinylcarbonyl oder Butinylcarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropylcarbonyl, Cyclobutylcarbonyl, Cyclopentylcarbonyl, Cyclohexylcarbonyl, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl oder Cyclohexylmethyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Trifluormethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Difluormethoxy oder Trifluormethoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Benzyl oder Phenylcarbonylmethyl.

20

Z steht besonders bevorzugt für



25

n steht ganz besonders bevorzugt für 0.

A steht ganz besonders bevorzugt für eine Einfachbindung oder für Methylen.

- 5 R¹ steht ganz besonders bevorzugt für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methoxy, Ethoxy, Methylthio, Ethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl.
- 10 R² steht ganz besonders bevorzugt für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, n- oder i-Propoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, oder für Cyclopropyl.
- 15 R³ steht ganz besonders bevorzugt für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Iod, Methyl, Ethyl, Trifluormethyl, Methoxymethyl, Methylthiomethyl, Methylsulfinylmethyl, Methylsulfonylmethyl, Methoxy, Ethoxy, Difluormethoxy, Trifluormethoxy, Methylthio, Ethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl oder Dimethylaminosulfonyl.
- 20 R⁴ steht besonders bevorzugt für Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, Trifluormethyl, Methoxymethyl, Methylthiomethyl, Methylsulfinylmethyl, Methylsulfonylmethyl, Methoxy, Ethoxy, Difluormethoxy, Trifluormethoxy, Methylthio, Ethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, Dimethylamino oder Dimethylaminosulfonyl.
- 25 R⁶ steht ganz besonders bevorzugt für Methyl, Cyclopropyl, Dimethylamino, Methoxy oder Ethoxy.
- Y steht ganz besonders bevorzugt für Wasserstoff.

A steht am meisten bevorzugt für Methylen.

R¹ steht am meisten bevorzugt für Methyl oder Ethyl.

5

R² steht am meisten bevorzugt für Wasserstoff oder Methyl.

R³ steht am meisten bevorzugt für Wasserstoff, Fluor, Chlor, Brom, Trifluormethyl oder Methylsulfonyl.

10

R⁴ steht am meisten bevorzugt für (2-)Chlor, (4-)Chlor, (6-)Trifluormethyl oder (2-)Methylsulfonyl.

15

Erfindungsgemäß bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (I), in welchen eine Kombination der vorstehend als bevorzugt aufgeführten Bedeutungen vorliegt.

Erfindungsgemäß besonders bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (I), in welchen eine Kombination der vorstehend als besonders bevorzugt aufgeführten Bedeutungen vorliegt.

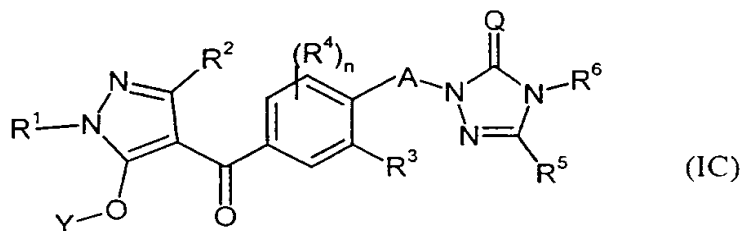
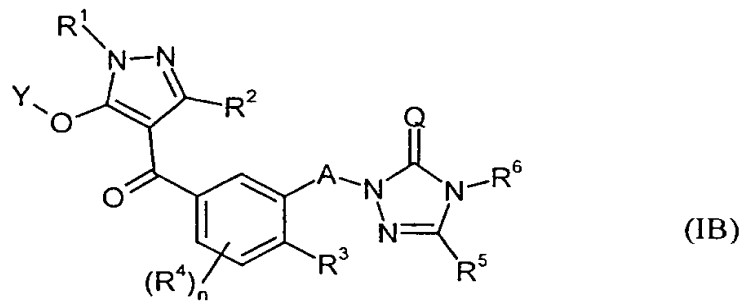
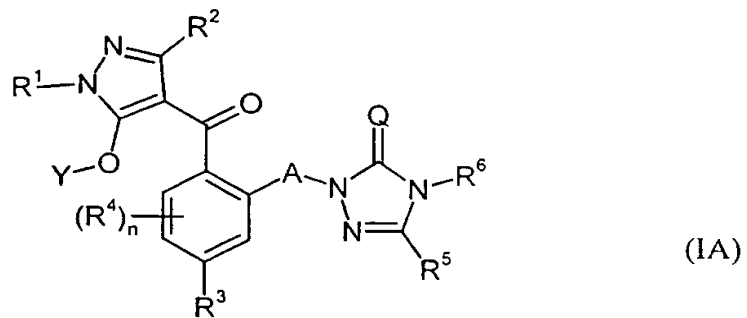
20

Erfindungsgemäß ganz besonders bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (I), in welchen eine Kombination der vorstehend als ganz besonders bevorzugt aufgeführten Bedeutungen vorliegt.

25

Erfindungsgemäß am meisten bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (I), in welchen eine Kombination der vorstehend als am meisten bevorzugt aufgeführten Bedeutungen vorliegt.

Die Verbindungen der allgemeinen Formeln (IA), (IB) und (IC) sind insbesondere Gegenstand der vorliegenden Erfindung:



in welchen

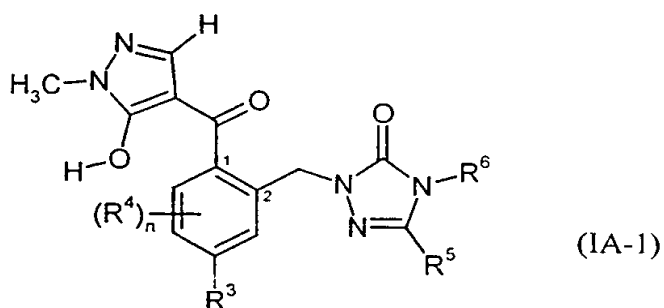
15 n, A, Q, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶ und Y die vorausstehend angegebene Bedeutung haben.

Gegenstand der Erfindung sind vorzugsweise auch Natrium-, Kalium-, Magnesium-, Calcium-, Ammonium-, C₁-C₄-Alkyl-ammonium-, Di-(C₁-C₄-alkyl)-ammonium-, Tri-(C₁-C₄-alkyl)-ammonium-, Tetra-(C₁-C₄-alkyl)-ammonium, Tri-(C₁-C₄-alkyl)-sulfonium-, C₅- oder C₆-Cycloalkyl-ammonium- und Di-(C₁-C₂-alkyl)-benzyl-ammonium-Salze von Verbindungen der Formel (I), in welcher n, A, R¹, R², R³, R⁴, Y und Z die oben angegebenen Bedeutungen haben.

Die oben aufgeführten allgemeinen oder in Vorzugsbereichen aufgeführten Restdefinitionen gelten sowohl für die Endprodukte der Formel (I) als auch entsprechend für die jeweils zur Herstellung benötigten Ausgangs- oder Zwischenprodukte. Diese Restdefinitionen können untereinander, also auch zwischen den angegebenen bevorzugten Bereichen beliebig kombiniert werden.

Beispiele für die erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) sind in den nachstehenden Gruppen aufgeführt.





Gruppe 1


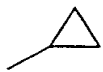
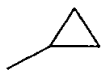


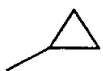


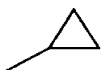
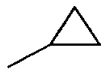


R³, (R⁴)_n, R⁵ und R⁶ haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

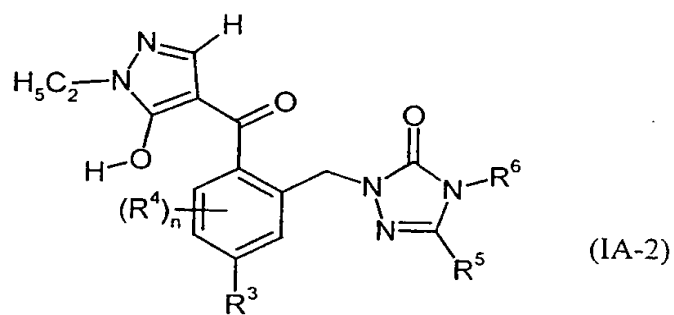
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
H	-	CF_3	CH_3
F	-	CF_3	CH_3
Cl	-	CF_3	CH_3
Br	-	CF_3	CH_3
I	-	CF_3	CH_3
NO_2	-	CF_3	CH_3
CN	-	CF_3	CH_3
CH_3	-	CF_3	CH_3
OCH_3	-	CF_3	CH_3
CF_3	-	CF_3	CH_3
$OCHF_2$	-	CF_3	CH_3
OCF_3	-	CF_3	CH_3
SO_2CH_3	-	CF_3	CH_3
H	-	OCH_3	CH_3
F	-	OCH_3	CH_3
Cl	-	OCH_3	CH_3
Br	-	OCH_3	CH_3
I	-	OCH_3	CH_3
NO_2	-	OCH_3	CH_3
CN	-	OCH_3	CH_3
CH_3	-	OCH_3	CH_3
OCH_3	-	OCH_3	CH_3
CF_3	-	OCH_3	CH_3
$OCHF_2$	-	OCH_3	CH_3

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
OCF ₃	-	OCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	OCH ₃	CH ₃
H	-	SCH ₃	CH ₃
F	-	SCH ₃	CH ₃
Cl	-	SCH ₃	CH ₃
Br	-	SCH ₃	CH ₃
I	-	SCH ₃	CH ₃
NO ₂	-	SCH ₃	CH ₃
CN	-	SCH ₃	CH ₃
CH ₃	-	SCH ₃	CH ₃
OCH ₃	-	SCH ₃	CH ₃
CF ₃	-	SCH ₃	CH ₃
OCHF ₂	-	SCH ₃	CH ₃
OCF ₃	-	SCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	SCH ₃	CH ₃
H	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
F	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
Br	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
I	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
NO ₂	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
CN	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
CH ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
OCH ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
CF ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
OCHF ₂	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
OCF ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
H	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
F	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
Cl	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
Br	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
I	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
NO ₂	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
CN	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
CH ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
OCH ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
CF ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
OCHF ₂	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
OCF ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
H	-	OCH ₃	
F	-	OCH ₃	
Cl	-	OCH ₃	
Br	-	OCH ₃	

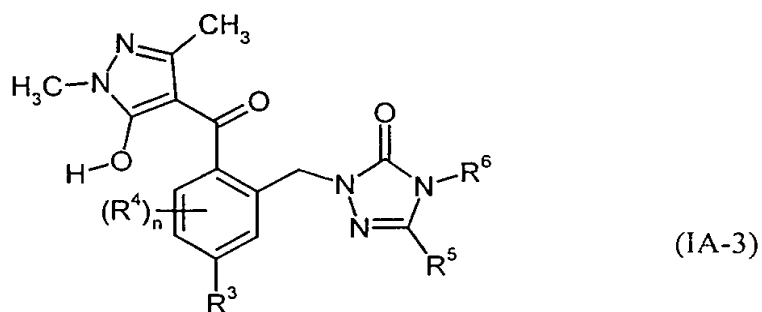
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
I	-	OCH_3	
NO_2	-	OCH_3	
CN	-	OCH_3	
CH_3	-	OCH_3	
OCH_3	-	OCH_3	
CF_3	-	OCH_3	
$OCHF_2$	-	OCH_3	
OCF_3	-	OCH_3	
SO_2CH_3	-	OCH_3	
H	(5-) Cl	CF_3	CH_3
F	(5-) Cl	CH_3	CH_3
Cl	(5-) Cl	OCH_3	CH_3
Br	(5-) Cl	Br	
Cl	(5-) Cl	CF_3	CH_3
NO_2	(5-) Cl	CH_3	CH_3
Cl	(5-) Cl	SCH_3	CH_3

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
CH_3	(5-) Cl	Cl	CH_3
OCH_3	(5-) Cl	OCH_3	CH_3
CF_3	(5-) Cl	CF_3	CH_3
$OCHF_2$	(5-) Cl	CH_3	CH_3
OCF_3	(5-) Cl	CH_3	CH_3
SO_2CH_3	(5-) Cl	OCH_3	CH_3

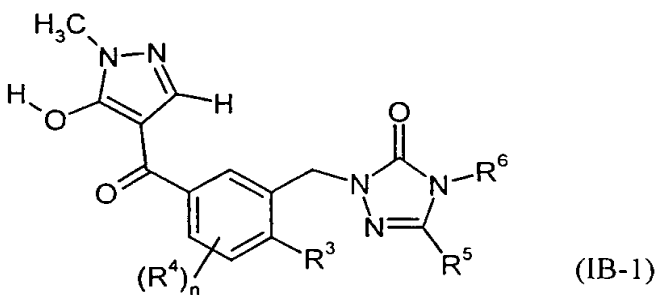
Gruppe 2

5

R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 1 angegebenen Bedeutungen.

Gruppe 3

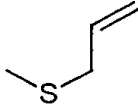
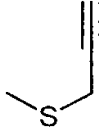
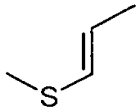
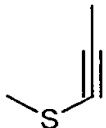
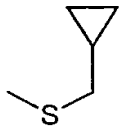
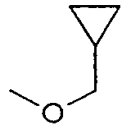
- 5 R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 1 angegebenen Bedeutungen.


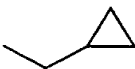
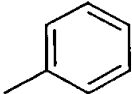
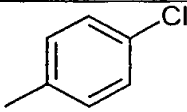
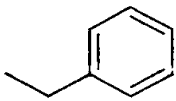
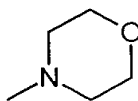
Gruppe 4

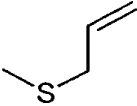
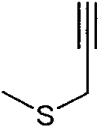
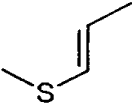
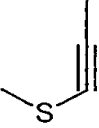
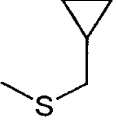
10

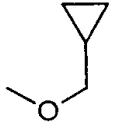

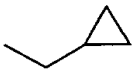
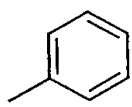
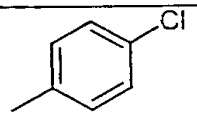
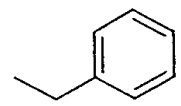
R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

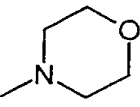
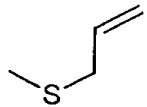
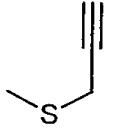
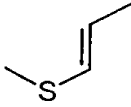
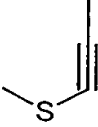
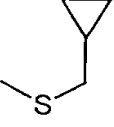
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl	CF ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	CH ₃

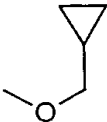

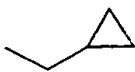
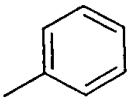
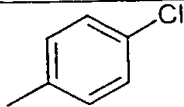
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl	SC ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CN	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	CH ₃
Cl	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	CH ₃
Cl	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	CH ₃

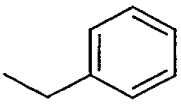
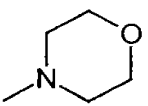
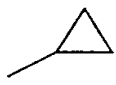
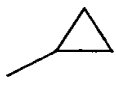
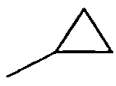
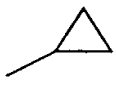
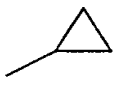
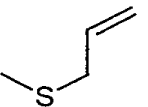
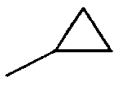
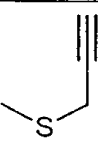
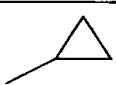
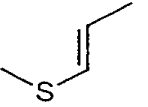
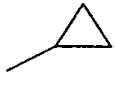
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl	H	CH ₃
Cl	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -s	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	Cl	CH ₃
Cl	(2-) Cl	Br	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CF ₃	CH ₃

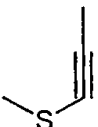

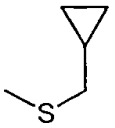










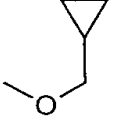

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CN	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	CH ₃











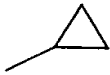

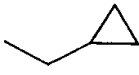


R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	H	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -s	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	CH ₃

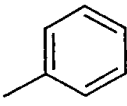

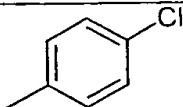

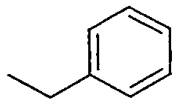


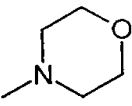








R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Cl	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Br	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CF ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH=C=CH ₂	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CN	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CH ₂ CN	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃

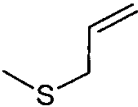
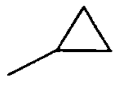
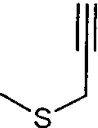

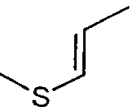
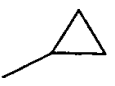
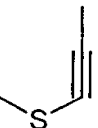
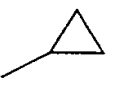
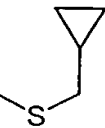
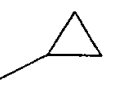




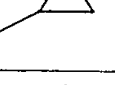
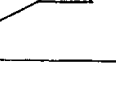
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₄ H ₉	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₂ CF ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₆ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	H	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -s	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -t	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CH=CHCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃


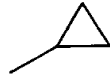
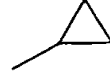
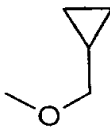
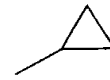
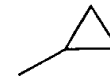

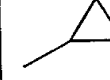
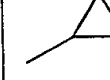

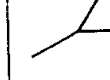
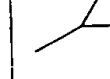


R^3	(Position-) (R^4) _n	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3		CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$	CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3		CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	Cl	CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	Br	CH_3
Cl	(2-) Cl	CF_3	
Cl	(2-) Cl	SCH_3	
Cl	(2-) Cl	SC_2H_5	
Cl	(2-) Cl	SC_3H_7	
Cl	(2-) Cl	$\text{SC}_3\text{H}_7\text{-i}$	
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		

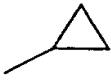


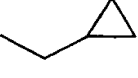


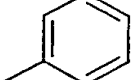
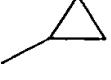
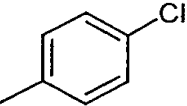
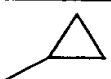
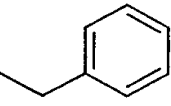
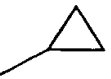
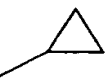
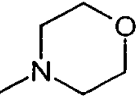
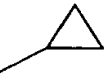

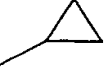
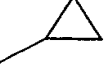
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CN	
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	
Cl	(2-) Cl	OCH ₃	
Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H _{7-i}	
Cl	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	
Cl	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	
Cl	(2-) Cl		

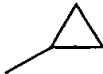
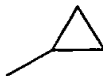
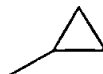

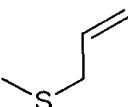

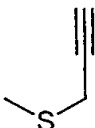
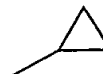
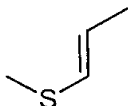
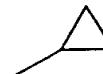
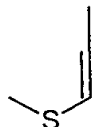
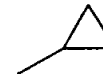
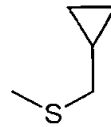
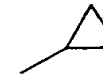

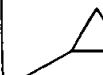
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl	OC_6H_5	
Cl	(2-) Cl	H	
Cl	(2-) Cl	CH_3	
Cl	(2-) Cl	C_2H_5	
Cl	(2-) Cl	C_3H_7	
Cl	(2-) Cl	C_3H_7-i	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9-i	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9-s	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9-t	
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	$CH=CHCH_3$	

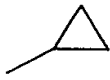

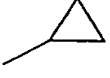
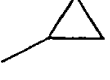

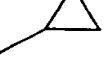
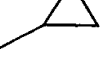
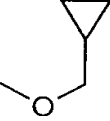

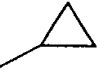



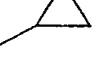
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	Cl	
Cl	(2-) Cl	Br	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CF ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H _{7-i}	

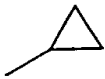
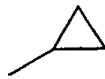

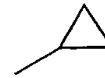

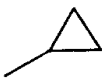

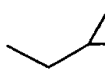


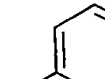
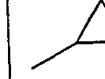


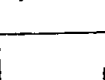
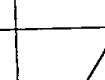
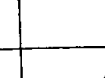
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl	$SCH=C=CH_2$	
SO_2CH_3	(2-) Cl	SCH_2CN	
SO_2CH_3	(2-) Cl	SCH_2CH_2CN	
SO_2CH_3	(2-) Cl	OCH_3	
SO_2CH_3	(2-) Cl	OC_2H_5	
SO_2CH_3	(2-) Cl	OC_3H_7	

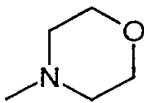
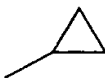
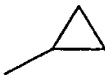

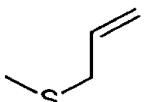
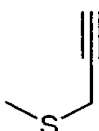
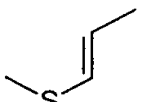
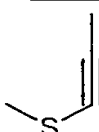
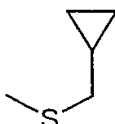
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H _{7-i}	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	H	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H _{7-i}	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H _{9-i}	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H _{9-s}	

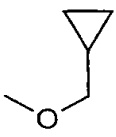
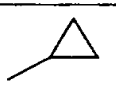
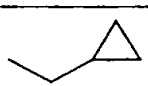
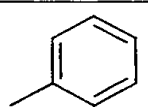
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Cl	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Br	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CF ₃	

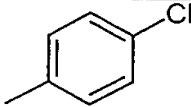
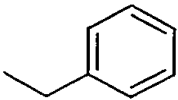
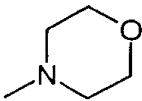
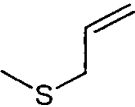
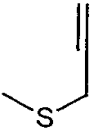
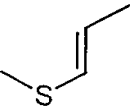
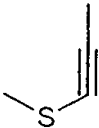
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_2H_5	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_3H_7	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_3H_7-i	
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3	$SCH=C=CH_2$	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_2CN	

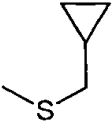
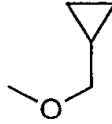

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_2CH_2CN	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_2H_5	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_3H_7	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_3H_7-i	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_4H_9	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_2CF_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_6H_5	
Cl	(2-) SO_2CH_3	H	
Cl	(2-) SO_2CH_3	CH_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_2H_5	
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_3H_7	

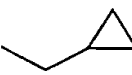
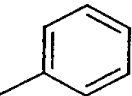
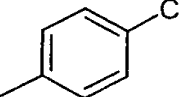
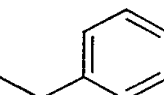
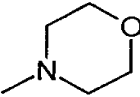
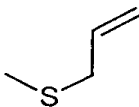
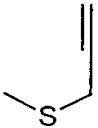
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_3\text{H}_7\text{-i}$	
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_4H_9	
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_4\text{H}_9\text{-i}$	
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_4\text{H}_9\text{-s}$	
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_4\text{H}_9\text{-t}$	
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{CH}=\text{CHCH}_3$	
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$	

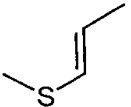
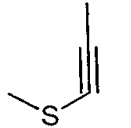
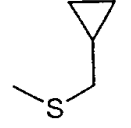
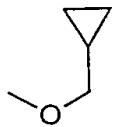
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	Cl	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	Br	
Cl	(2-) Cl	CF ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SC ₃ H _{7-i}	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CN	N(CH ₃) ₂


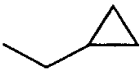
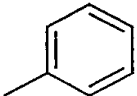
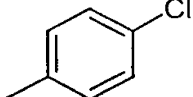
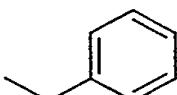
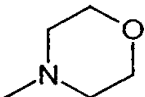
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	H	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	CH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -s	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	Cl	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	Br	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CF ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	H	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -s	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂

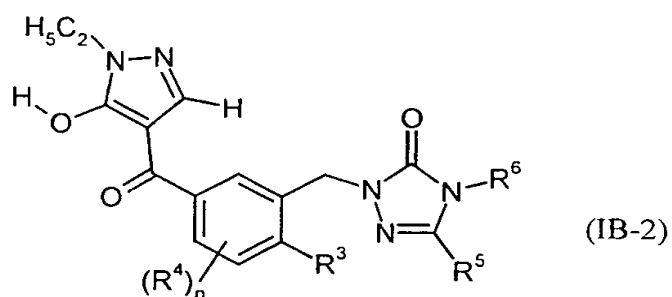
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Cl	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Br	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CF ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH=C=CH ₂	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₂ CF ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₆ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	H	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -i	N(CH ₃) ₂

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -s	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -t	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CH=CHCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	N(CH ₃) ₂	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	Cl	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	Br	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	CH ₃	OCH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₂ H ₅	OCH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇	OCH ₃
Cl	(2-) Cl	SCH ₃	OCH ₃
Cl	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	OCH ₃
Cl	(2-) Cl	OCH ₃	OCH ₃
Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	OCH ₃
Cl	(2-) Cl	CH ₃	OC ₂ H ₅

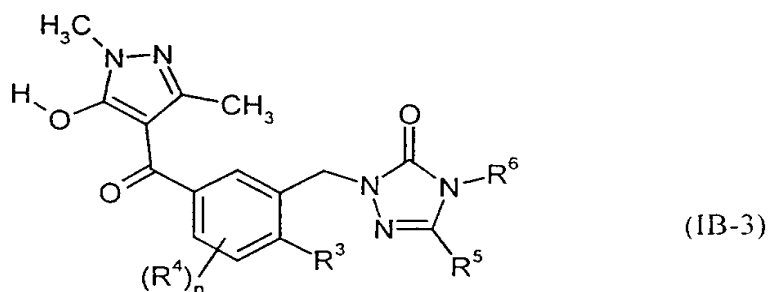
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl	C_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	C_3H_7	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	SCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	SC_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	OCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	OC_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	CH_3	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_3H_7	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_3	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_3	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	CH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_3H_7	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_2H_5	OC_2H_5
SO_2CH_3	(2-) Cl	Cl	OCH_3
SO_2CH_3	(2-) Cl	Br	OCH_3
SO_2CH_3	(2-) Cl	CH_3	OCH_3
SO_2CH_3	(2-) Cl	C_2H_5	OCH_3
SO_2CH_3	(2-) Cl	C_3H_7	OCH_3
SO_2CH_3	(2-) Cl	SCH_3	OCH_3
SO_2CH_3	(2-) Cl	SC_2H_5	OCH_3
SO_2CH_3	(2-) Cl	OCH_3	OC_2H_5

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	OC ₂ H ₅
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇	OC ₂ H ₅
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	OC ₂ H ₅
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃	OC ₂ H ₅

Gruppe 5

5

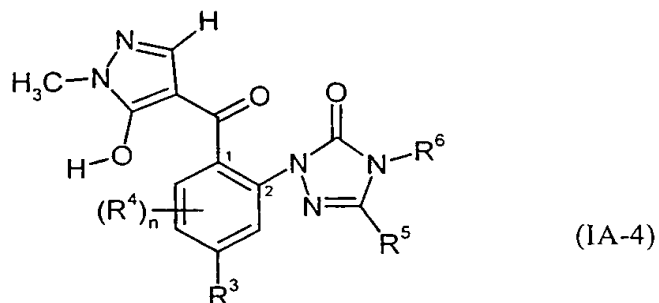
R³, (R⁴)_n, R⁵ und R⁶ haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 4 angegebenen Bedeutungen.

Gruppe 6

10

R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 4 angegebenen Bedeutungen.

Gruppe 7



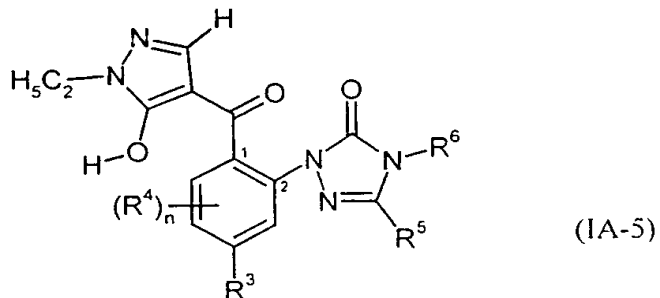
5

R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
H	-	CF_3	CH_3
F	-	CF_3	CH_3
Cl	-	CF_3	CH_3
Br	-	CF_3	CH_3

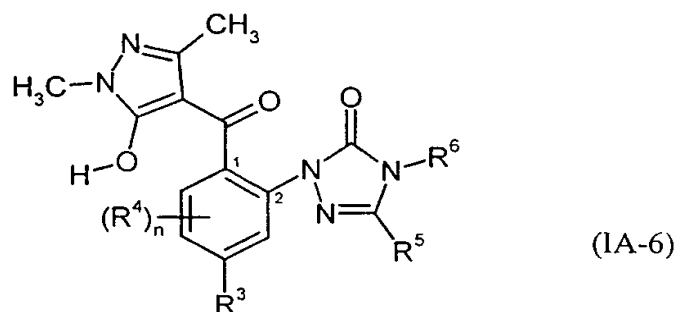
10

Gruppe 8



R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 7 angegebenen Bedeutungen.

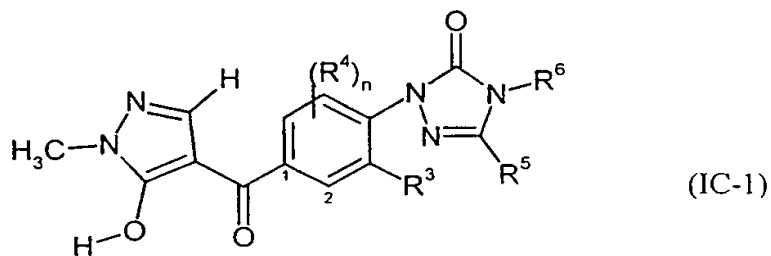
Gruppe 9



5

R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 7 angegebenen Bedeutungen.

10 Gruppe 10

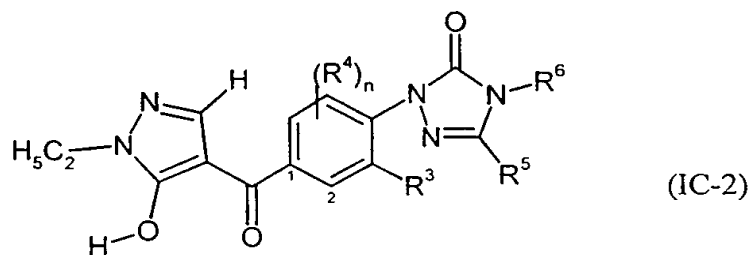


R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

15

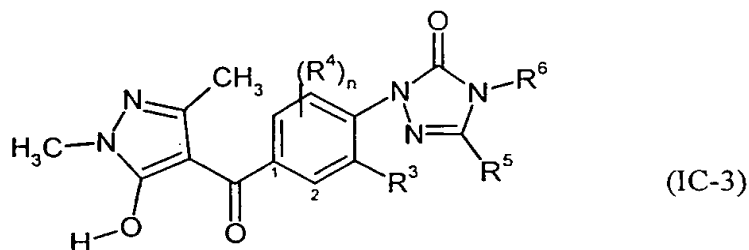
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
H	(2-) F	CF_3	CH_3
H	(2-) Cl	CF_3	CH_3
H	(2-) Br	CF_3	CH_3
H	-	CF_3	CH_3

Gruppe 11



5 R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 10 angegebenen Bedeutungen.

Gruppe 12

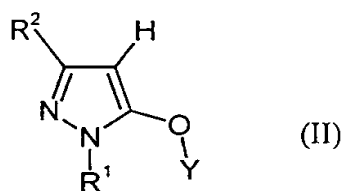


10 R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 10 angegebenen Bedeutungen.

Die neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) zeichnen sich
15 durch starke und selektive herbizide Wirksamkeit aus.

Man erhält die neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I), wenn man

20 (a) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)

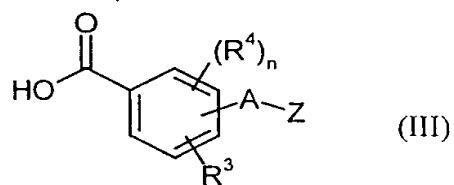


in welcher

R^1 , R^2 und Y die oben angegebene Bedeutung haben,

5

mit substituierten Benzoesäuren der allgemeinen Formel (III),



in welcher

10

n, A, R^3 , R^4 und Z die oben angegebene Bedeutung haben,

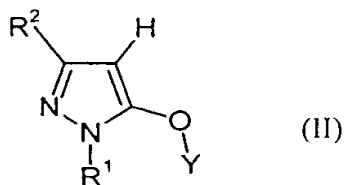
in Gegenwart eines Dehydratisierungsmittels, gegebenenfalls in Gegenwart eines
oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Ver-
dünnungsmittels umsetzt,

15

oder wenn man

(b) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)

20

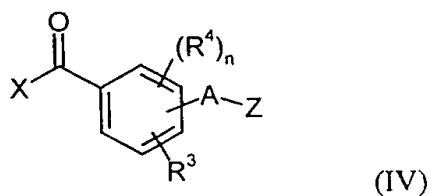


in welcher

R^1 , R^2 und Y die oben angegebene Bedeutung haben,

mit substituierten Benzoesäurederivaten der allgemeinen Formel (IV)

5



in welcher

n , A , R^3 , R^4 und Z die oben angegebene Bedeutung haben, und

10

X für Cyano, Halogen oder Alkoxy steht,

- oder mit entsprechenden Carbonsäureanhydriden -

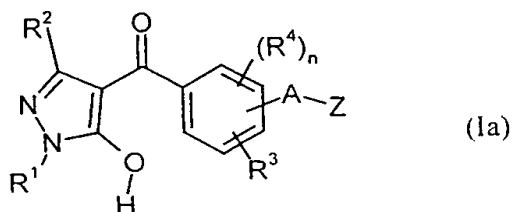
15

gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umgesetzt,

oder wenn man

20

(c) substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (Ia)



in welcher

n, A, R^1, R^2, R^3, R^4 und Z die oben angegebene Bedeutung haben,

mit Verbindungen der allgemeinen Formel (V)

5 H-Y (V)

in welcher

Y mit Ausnahme von Wasserstoff die oben angegebene Bedeutung hat,

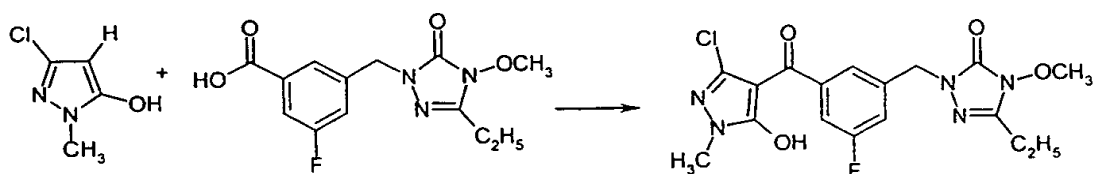
10 - oder gegebenenfalls mit entsprechenden Isocyanaten oder Isothiocyanaten -

gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umgesetzt,

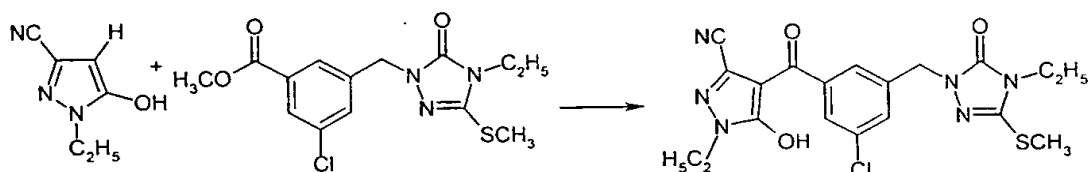
15 und gegebenenfalls im Anschluss daran an den so erhaltenen Verbindungen der Formel (I) im Rahmen der Substituentendefinition auf übliche Weise elektrophile oder nucleophile bzw. Oxidations- oder Reduktionsreaktionen durchführt oder die Verbindungen der Formel (I) auf übliche Weise in Salze überführt.

20 Die Verbindungen der Formel (I) können nach üblichen Methoden in andere Verbindungen der Formel (I) gemäß obiger Definition umgewandelt werden, beispielsweise durch nucleophile Substitution (z.B. R^5 : $Cl \rightarrow OC_2H_5$, SCH_3) oder durch Oxidation (z.B. R^5 : $CH_2SCH_3 \rightarrow CH_2S(O)CH_3$).

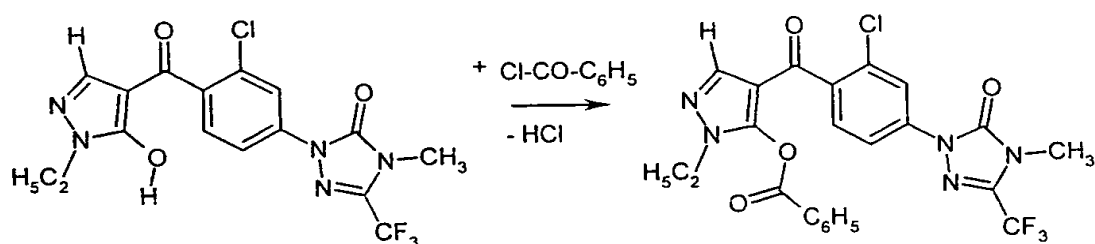
25 Verwendet man beispielsweise 3-Chlor-5-hydroxy-1-methyl-pyrazol und 2-(3-Carboxy-5-fluor-benzyl)-5-ethyl-4-methoxy-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als Ausgangsstoffe, so kann der Reaktionsablauf beim erfindungsgemäßen Verfahren (a) durch das folgende Formelschema skizziert werden:



- Verwendet man beispielsweise 3-Cyano-5-hydroxy-1-ethyl-pyrazol und 2-(3-Methoxycarbonyl-5-chlor-benzyl)-4-ethyl-5-methylthio-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als Ausgangsstoffe, so kann der Reaktionsablauf beim erfindungsgemäßen Verfahren (b) durch das folgende Formelschema skizziert werden:



- Verwendet man beispielsweise 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-[3-chlor-4-(1-ethyl-5-hydroxy-pyrazol-4-yl-carbonyl)-phenyl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on und Benzoylchlorid als Ausgangsstoffe, so kann der Reaktionsablauf beim erfindungsgemäßen Verfahren (c) durch das folgende Formelschema skizziert werden:



15

- Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (a) zur Herstellung von Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als Ausgangsstoffe zu verwendenden Pyrazole sind durch die Formel (II) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel (II) haben R¹, R² und Y vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als

20

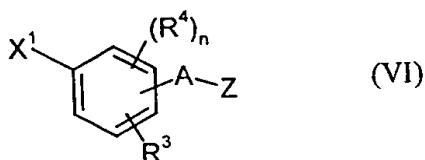
bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für R^1 , R^2 und Y angegeben worden sind.

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (II) sind bekannt und/oder können nach
5 an sich bekannten Verfahren hergestellt werden (vgl. EP-A-240001).

Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (a) weiter als Ausgangsstoffe zu verwendenden substituierten Benzoesäuren sind durch die Formel (III) allgemein definiert. In der Formel (III) haben n, A, R^3 , R^4 und Z vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz
10 besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für n, A, R^3 , R^4 und Z angegeben wurden.

15 Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (III) sind mit Ausnahme von 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4-difluormethyl-5-methyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on - alias 2,4-Dichlor-5-(4-difluormethyl-4,5-dihydro-3-methyl-5-oxo-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-benzoesäure (CAS-Reg.-Nr. 90208-77-8) und 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4,5-dimethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on - alias 2,4-Dichlor-
20 5-(4,5-dihydro-3,4-dimethyl-5-oxo-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-benzoesäure (CAS-Reg.-Nr. 90208-76-7) - noch nicht aus der Literatur bekannt. Sie sind jedoch unter Ausnahme von 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4-difluormethyl-5-methyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on und 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4,5-dimethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on (vgl. JP-A-58225070 - zitiert in Chem. Abstracts
25 100:209881, JP-A-02015069 - zitiert in Chem. Abstracts 113:23929) Gegenstand einer vorgängigen, jedoch nicht vorveröffentlichten Anmeldung (vgl. DE-A-19833360).

Man erhält die substituierten Benzoesäuren der allgemeinen Formel (III), wenn man
30 Benzoesäurederivate der allgemeinen Formel (VI),



in welcher

n, A, R³ und R⁴ und Z die oben angegebene Bedeutung haben, und

5

X¹ für Cyano, Carbamoyl, Halogencarbonyl oder Alkoxycarbonyl steht,

mit Wasser, gegebenenfalls in Gegenwart eines Hydrolysehilfsmittels, wie z.B. Schwefelsäure, bei Temperaturen zwischen 50°C und 120°C umgesetzt (vgl. die Her-

10

Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (b) zur Herstellung von Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als Ausgangsstoffe zu verwendenden substituierten Benzoesäurederivate sind durch die Formel (IV) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel (IV) haben n, A, R³, R⁴ und Z vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für n, A, R³, R⁴ und Z angegeben worden sind; X steht vorzugsweise für Cyano, Fluor, Chlor, Brom oder C₁-C₄-Alkoxy, insbesondere für Chlor, Methoxy oder Ethoxy.

15

20

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (IV) – sowie die Vorprodukte der allgemeinen Formel (VI) – sind bekannt und/oder können nach an sich bekannten Verfahren hergestellt werden (vgl. DE-A-3839480, DE-A-4239296, EP-A-597360, EP-A-609734, DE-A-4303676, EP-A-617026, DE-A-4405614, US-A-5378681).

25

Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (c) zur Herstellung von Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als Ausgangsstoffe zu verwendenden substituierten Benzoylpyrazole sind durch die Formel (Ia) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel

(Ia) haben n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z angegeben worden sind.

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (Ia) sind erfindungsgemäße, neue Verbindungen; sie können nach den erfindungsgemäßen Verfahren (a) und (b) hergestellt werden.

Die beim erfindungsgemäßen (c) weiter als Ausgangsstoffe zu verwendenden Verbindungen sind durch die Formel (V) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel (V) hat Y vorzugsweise diejenige Bedeutung, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für Y angegeben worden ist.

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (V) sind bekannte Syntheschemikalien.

Das erfindungsgemäße Verfahren (a) zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) wird unter Verwendung eines Dehydratisierungsmittels durchgeführt. Es kommen hierbei die üblichen zur Bindung von Wasser geeigneten Chemikalien in Betracht.

Als Beispiele hierfür seien Dicyclohexylcarbodiimid und Carbonyl-bis-imidazol genannt.

Als besonders gut geeignetes Dehydratisierungsmittel sei Dicyclohexylcarbodiimid genannt.

Das erfindungsgemäße Verfahren (a) zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) wird gegebenenfalls unter Verwendung eines Reaktionshilfsmittels durchgeführt.

- 5 Als Beispiele hierfür seien Natriumcyanid, Kaliumcyanid, Acetoncyanhydrin, 2-Cyano-2-(trimethylsilyloxy)-propan und Trimethylsilylcyanid genannt.

Als besonders gut geeignetes Reaktionshilfsmittel sei Trimethylsilylcyanid genannt.

- 10 Das erfindungsgemäße Verfahren (b) zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) wird gegebenenfalls unter Verwendung von Reaktionshilfsmitteln durchgeführt.

- 15 Als Beispiele hierfür seien (konz.) Schwefelsäure, Zinkchlorid, Aluminiumchlorid, und Borfluorid genannt.

- Die erfindungsgemäßen Verfahren zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) werden gegebenenfalls unter Verwendung weiterer Reaktionshilfsmittel durchgeführt. Als (weitere) Reaktionshilfsmittel für die
- 20 erfindungsgemäßen Verfahren kommen im allgemeinen basische organische Stickstoffverbindungen, wie beispielsweise Trimethylamin, Triethylamin, Tripropylamin, Tributylamin, Ethyl-diisopropylamin, N,N-Dimethyl-cyclohexylamin, Dicyclohexylamin, Ethyl-dicyclohexylamin, N,N-Dimethyl-anilin, N,N-Dimethyl-benzylamin, Pyridin, 2-Methyl-, 3-Methyl-, 4-Methyl-, 2,4-Dimethyl-, 2,6-Dimethyl-, 3,4-Dimethyl- und 3,5-Dimethyl-pyridin, 5-Ethyl-2-methyl-pyridin, 4-Dimethylamino-
- 25 pyridin, N-Methyl-piperidin, 1,4-Diazabicyclo[2,2,2]-octan (DABCO), 1,5-Diazabicyclo[4,3,0]-non-5-en (DBN), oder 1,8-Diazabicyclo[5,4,0]-undec-7-en (DBU) in Betracht.

- 30 Als Verdünnungsmittel zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) kommen vor allem inerte organische Lösungsmittel in Betracht. Hierzu

gehören insbesondere aliphatische, alicyclische oder aromatische, gegebenenfalls halogenierte Kohlenwasserstoffe, wie beispielsweise Benzin, Benzol, Toluol, Xylol, Chlorbenzol, Dichlorbenzol, Petrolether, Hexan, Cyclohexan, Dichlormethan, Chloroform, Tetrachlormethan oder 1,2-Dichlor-ethan; Ether, wie Diethylether, Di-
5 isopropylether, Dioxan, Tetrahydrofuran, Ethylenglykoldimethyl- oder -diethylether; Ketone, wie Aceton, Butanon oder Methyl-isobutyl-keton; Nitrile, wie Acetonitril, Propionitril oder Butyronitril; Amide, wie N,N-Dimethylformamid, N,N-Dimethyl-acetamid, N-Methyl-formanilid, N-Methyl-pyrrolidon oder Hexamethylphosphor-säuretriamid; Ester wie Essigsäuremethylester oder Essigsäureethylester, Sulfoxide,
10 wie Dimethylsulfoxid.

Die Reaktionstemperaturen können bei der Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) in einem größeren Bereich variiert werden. Im allgemeinen arbeitet man bei Temperaturen zwischen 0°C und 150°C, vorzugsweise zwischen
15 10°C und 120°C.

Die erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) werden im allgemeinen unter Normaldruck durchgeführt. Es ist jedoch auch möglich, die erfindungsgemäßen Ver-
fahren unter erhöhtem oder vermindertem Druck - im allgemeinen zwischen 0,1 bar
20 und 10 bar - durchzuführen.

Zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) werden die Aus-
gangsstoffe im allgemeinen in angenähert äquimolaren Mengen eingesetzt. Es ist
jedoch auch möglich, eine der Komponenten in einem größeren Überschuss zu ver-
25 wenden. Die Umsetzung wird im allgemeinen in einem geeigneten Verdünnungs-
mittel in Gegenwart eines Dehydratisierungsmittels durchgeführt und das Reaktions-
gemisch wird im allgemeinen mehrere Stunden bei der erforderlichen Temperatur ge-
rührt. Die Aufarbeitung wird nach üblichen Methoden durchgeführt (vgl. die Her-
stellungsbeispiele).

30

Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können als Defolianten, Desiccants, Krautabtötungsmittel und insbesondere als Unkrautvernichtungsmittel verwendet werden. Unter Unkraut im weitesten Sinne sind alle Pflanzen zu verstehen, die an Orten aufwachsen, wo sie unerwünscht sind. Ob die erfindungsgemäßen Stoffe als totale oder
5 selektive Herbizide wirken, hängt im wesentlichen von der angewendeten Menge ab.

Erfindungsgemäß können alle Pflanzen und Pflanzenteile behandelt werden. Unter Pflanzen werden hierbei alle Pflanzen und Pflanzenpopulationen verstanden, wie erwünschte und unerwünschte Wildpflanzen oder Kulturpflanzen (einschließlich natürlich vorkommender Kulturpflanzen). Kulturpflanzen können Pflanzen sein, die durch
10 konventionelle Züchtungs- und Optimierungsmethoden oder durch biotechnologische und gentechnologische Methoden oder Kombinationen dieser Methoden erhalten werden können, einschließlich der transgenen Pflanzen und einschließlich der durch Sortenschutzrechte schützba-
ren oder nicht schützba-
15 ren Pflanzensorten. Unter Pflanzenteilen sollen alle oberirdischen und unterirdischen Teile und Organe der Pflanzen, wie Spross, Blatt, Blüte und Wurzel verstanden werden, wobei beispielhaft Blätter, Nadeln, Stengel, Stämme, Blüten, Fruchtkörper, Früchte und Samen sowie Wurzeln, Knollen und Rhizome aufgeführt werden. Zu den Pflanzenteilen gehört
auch Erntegut sowie vegetatives und generatives Vermehrungsmaterial, beispielsweise
20 Stecklinge, Knollen, Rhizome, Ableger und Samen.

Die erfindungsgemäße Behandlung der Pflanzen und Pflanzenteile mit den Wirkstoffen erfolgt direkt oder durch Einwirkung auf deren Umgebung, Lebensraum oder Lagerraum nach den üblichen Behandlungsmethoden, z.B. durch Tauchen, Sprühen,
25 Verdampfen, Vernebeln, Streuen, Aufstreichen und bei Vermehrungsmaterial, insbesondere bei Samen, weiterhin durch ein- oder mehrschichtiges Umhüllen.

Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können z.B. bei den folgenden Pflanzen verwendet werden:

Dikotyle Unkräuter der Gattungen: Sinapis, Lepidium, Galium, Stellaria, Matricaria, Anthemis, Galinsoga, Chenopodium, Urtica, Senecio, Amaranthus, Portulaca, Xanthium, Convolvulus, Ipomoea, Polygonum, Sesbania, Ambrosia, Cirsium, Carduus, Sonchus, Solanum, Rorippa, Rotala, Lindernia, Lamium, Veronica, Abutilon, Emex, Datura, Viola, Galeopsis, Papaver, Centaurea, Trifolium, Ranunculus, Taraxacum.

Dikotyle Kulturen der Gattungen: Gossypium, Glycine, Beta, Daucus, Phaseolus, Pisum, Solanum, Linum, Ipomoea, Vicia, Nicotiana, Lycopersicon, Arachis, Brassica, Lactuca, Cucumis, Cucurbita.

Monokotyle Unkräuter der Gattungen: Echinochloa, Setaria, Panicum, Digitaria, Phleum, Poa, Festuca, Eleusine, Brachiaria, Lolium, Bromus, Avena, Cyperus, Sorghum, Agropyron, Cynodon, Monochoria, Fimbristylis, Sagittaria, Eleocharis, Scirpus, Paspalum, Ischaemum, Sphenoclea, Dactyloctenium, Agrostis, Alopecurus, Apera, Aegilops, Phalaris.

Monokotyle Kulturen der Gattungen: Oryza, Zea, Triticum, Hordeum, Avena, Secale, Sorghum, Panicum, Saccharum, Ananas, Asparagus, Allium.

Die Verwendung der erfindungsgemäßen Wirkstoffe ist jedoch keineswegs auf diese Gattungen beschränkt, sondern erstreckt sich in gleicher Weise auch auf andere Pflanzen.

Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe eignen sich in Abhängigkeit von der Konzentration zur Totalunkrautbekämpfung, z.B. auf Industrie- und Gleisanlagen und auf Wegen und Plätzen mit und ohne Baumbewuchs. Ebenso können die erfindungsgemäßen Wirkstoffe zur Unkrautbekämpfung in Dauerkulturen, z.B. Forst, Ziergehölz-, Obst-, Wein-, Citrus-, Nuss-, Bananen-, Kaffee-, Tee-, Gummi-, Ölpalm-, Kakao-, Beerenfrucht- und Hopfenanlagen, auf Zier- und Sportrasen und Weide-

flächen sowie zur selektiven Unkrautbekämpfung in einjährigen Kulturen eingesetzt werden.

5 Die erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel (I) zeigen starke herbizide Wirksamkeit und ein breites Wirkungsspektrum bei Anwendung auf dem Boden und auf oberirdische Pflanzenteile. Sie eignen sich in gewissem Umfang auch zur selektiven Bekämpfung von monokotylen und dikotylen Unkräutern in monokotylen und dikotylen Kulturen, sowohl im Vorauf- als auch im Nachauf-Verfahren.

10 Die Wirkstoffe können in die üblichen Formulierungen übergeführt werden, wie Lösungen, Emulsionen, Spritzpulver, Suspensionen, Pulver, Stäubemittel, Pasten, lösliche Pulver, Granulate, Suspensions-Emulsions-Konzentrate, Wirkstoff-impregnierte Natur- und synthetische Stoffe sowie Feinstverkapselungen in polymeren Stoffen.

15 Diese Formulierungen werden in bekannter Weise hergestellt, z. B. durch Vermischen der Wirkstoffe mit Streckmitteln, also flüssigen Lösungsmitteln und/oder festen Trägerstoffen, gegebenenfalls unter Verwendung von oberflächenaktiven Mitteln, also Emulgiermitteln und/oder Dispergiermitteln und/oder schaum-
20 erzeugenden Mitteln.

Im Falle der Benutzung von Wasser als Streckmittel können z.B. auch organische Lösungsmittel als Hilfslösungsmittel verwendet werden. Als flüssige Lösungsmittel kommen im wesentlichen in Frage: Aromaten, wie Xylol, Toluol, oder Alkyl-
25 naphthaline, chlorierte Aromaten und chlorierte aliphatische Kohlenwasserstoffe, wie Chlorbenzole, Chlorethylene oder Methylenchlorid, aliphatische Kohlenwasserstoffe, wie Cyclohexan oder Paraffine, z.B. Erdölfraktionen, mineralische und pflanzliche Öle, Alkohole, wie Butanol oder Glykol sowie deren Ether und Ester, Ketone wie Aceton, Methylethylketon, Methylisobutylketon oder Cyclohexanon, stark polare
30 Lösungsmittel, wie Dimethylformamid und Dimethylsulfoxid, sowie Wasser.

- Als feste Trägerstoffe kommen in Frage: z.B. Ammoniumsalze und natürliche Gesteinsmehle, wie Kaoline, Tonerden, Talkum, Kreide, Quarz, Attapulgit, Montmorillonit oder Diatomeenerde und synthetische Gesteinsmehle, wie hochdisperse Kieselsäure, Aluminiumoxid und Silikate, als feste Trägerstoffe für Granulate
- 5 kommen in Frage: z.B. gebrochene und fraktionierte natürliche Gesteine wie Calcit, Marmor, Bims, Sepiolith, Dolomit sowie synthetische Granulate aus anorganischen und organischen Mehlen sowie Granulate aus organischem Material wie Sägemehl, Kokosnussschalen, Maiskolben und Tabakstengeln; als Emulgier- und/oder schaum-
erzeugende Mittel kommen in Frage: z.B. nichtionogene und anionische
- 10 Emulgatoren, wie Polyoxyethylen-Fettsäure-Ester, Polyoxyethylen-Fettalkohol-Ether, z.B. Alkylarylpolyglykolether, Alkylsulfonate, Alkylsulfate, Arylsulfonate sowie Eiweißhydrolysate; als Dispergiermittel kommen in Frage: z.B. Lignin-Sulfit-ablaugen und Methylcellulose.
- 15 Es können in den Formulierungen Haftmittel wie Carboxymethylcellulose, natürliche und synthetische pulvrige, körnige oder latexförmige Polymere verwendet werden, wie Gummiarabicum, Polyvinylalkohol, Polyvinylacetat, sowie natürliche Phospholipide, wie Kephaline und Lecithine und synthetische Phospholipide. Weitere Additive können mineralische und vegetabile Öle sein.
- 20 Es können Farbstoffe wie anorganische Pigmente, z.B. Eisenoxid, Titanoxid, Ferrocyanblau und organische Farbstoffe, wie Alizarin-, Azo- und Metallphthalocyanin-farbstoffe und Spurennährstoffe wie Salze von Eisen, Mangan, Bor, Kupfer, Kobalt, Molybdän und Zink verwendet werden.
- 25 Die Formulierungen enthalten im allgemeinen zwischen 0,1 und 95 Gewichtsprozent Wirkstoff, vorzugsweise zwischen 0,5 und 90 %.
- 30 Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können als solche oder in ihren Formulierungen auch in Mischung mit bekannten Herbiziden zur Unkrautbekämpfung Verwendung finden, wobei Fertigformulierungen oder Tankmischungen möglich sind.

Für die Mischungen kommen bekannte Herbizide infrage, beispielsweise

Acetochlor, Acifluorfen(-sodium), Aclonifen, Alachlor, Alloxydim(-sodium),
5 Ametryne, Amidochlor, Amidosulfuron, Anilofos, Asulam, Atrazine, Azafenidin,
Azimsulfuron, Benazolin(-ethyl), Benfuresate, Bensulfuron(-methyl), Bentazon,
Benzofenap, Benzoylprop(-ethyl), Bialaphos, Bifenox, Bispyribac(-sodium), Bromo-
butide, Bromofenoxim, Bromoxynil, Butachlor, Butroxydim, Butylate, Cafenstrole,
Caloxydim, Carbetamide, Carfentrazone(-ethyl), Chlomethoxyfen, Chloramben,
10 Chloridazon, Chlorimuron(-ethyl), Chlornitrofen, Chlorsulfuron, Chlortoluron, Cini-
don(-ethyl), Cinmethylin, Cinosulfuron, Clethodim, Clodinafop(-propargyl),
Clomazone, Clomeprop, Clopyralid, Clopyrasulfuron(-methyl), Cloransulam(-
methyl), Cumyluron, Cyanazine, Cybutryne, Cycloate, Cyclosulfamuron, Cycloxy-
dim, Cyhalofop(-butyl), 2,4-D, 2,4-DB, 2,4-DP, Desmedipham, Diallylate, Dicamba,
15 Diclofop(-methyl), Diclosulam, Diethatyl(-ethyl), Difenzoquat, Diflufenican, Diflu-
fenzoppyr, Dimefuron, Dimepiperate, Dimethachlor, Dimethametryn, Dimethenamid,
Dimexyflam, Dinitramine, Diphenamid, Diquat, Dithiopyr, Diuron, Dymron, Epo-
prodan, EPTC, Esprocarb, Ethalfluralin, Ethametsulfuron(-methyl), Ethofumesate,
Ethoxyfen, Ethoxysulfuron, Etobenzanid, Fenoxaprop(-P-ethyl), Flamprop(-iso-
20 propyl), Flamprop(-isopropyl-L), Flamprop(-methyl), Flazasulfuron, Fluazifop(-P-
butyl), Fluazolate, Flucarbazon, Flufenacet, Flumetsulam, Flumiclorac(-pentyl),
Flumioxazin, Flumipropyn, Flumetsulam, Fluometuron, Fluorochloridone, Fluoro-
glycofen(-ethyl), Flupoxam, Flupropacil, Flurpysulfuron(-methyl, -sodium),
Flurenol(-butyl), Fluridone, Fluroxypyr(-meptyl), Flurprimidol, Flurtamone, Flu-
25 thiacet(-methyl), Fluthiamide, Fomesafen, Glufosinate(-ammonium), Glyphosate(-
isopropylammonium), Halosafen, Haloxyfop(-ethoxyethyl), Haloxyfop(-P-methyl),
Hexazinone, Imazamethabenz(-methyl), Imazamethapyr, Imazamox, Imazapic,
Imazapyr, Imazaquin, Imazethapyr, Imazosulfuron, Iodosulfuron, Ioxynil, Iso-
propalin, Isoproturon, Isouron, Isoxaben, Isoxachlortole, Isoxaflutole, Isoxapyrifop,
30 Lactofen, Lenacil, Linuron, MCPA, MCPP, Mefenacet, Mesotrione, Metamitron,
Metazachlor, Methabenzthiazuron, Metobenzuron, Metobromuron, (alpha-)Metola-

chlor, Metosulam, Metoxuron, Metribuzin, Metsulfuron(-methyl), Molinate, Monolinuron, Naproanilide, Napropamide, Neburon, Nicosulfuron, Norflurazon, Orben-carb, Oryzalin, Oxadiargyl, Oxadiazon, Oxasulfuron, Oxaziclomefone, Oxyfluorfen, Paraquat, Pelargonsäure, Pendimethalin, Pentoxazone, Phenmedipham, Picolinafen, Piperophos, Pretilachlor, Primisulfuron(-methyl), Prometryn, Propachlor, Propanil, Propaquizafop, Propisochlor, Propyzamide, Prosulfocarb, Prosulfuron, Pyraflufen(-ethyl), Pyrazolate, Pyrazosulfuron(-ethyl), Pyrazoxyfen, Pyribenzoxim, Pyributicarb, Pyridate, Pyriminobac(-methyl), Pyriothiobac(-sodium), Quinchlorac, Quinmerac, Quinoclamine, Quizalofop(-P-ethyl), Quizalofop(-P-tefuryl), Rimsulfuron, Sethoxydim, Simazine, Simetryn, Sulcotrione, Sulfentrazone, Sulfometuron(-methyl), Sulfosate, Sulfosulfuron, Tebutam, Tebuthiuron, Tepraloxym, Terbutylazine, Terbutryn, Thenylchlor, Thiafluamide, Thiazopyr, Thidiazimin, Thifensulfuron(-methyl), Thiobencarb, Tiocarbamil, Tralkoxydim, Triallate, Triasulfuron, Tribenuron(-methyl), Triclopyr, Tridiphane, Trifluralin, Triflusulfuron und Tritosulfuron.

Auch eine Mischung mit anderen bekannten Wirkstoffen, wie Fungiziden, Insektiziden, Akariziden, Nematiziden, Schutzstoffen gegen Vogelfraß, Pflanzennährstoffen und Bodenstruktur-verbesserungsmitteln ist möglich.

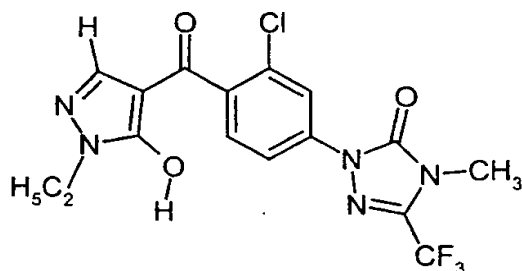
Die Wirkstoffe können als solche, in Form ihrer Formulierungen oder den daraus durch weiteres Verdünnen bereiteten Anwendungsformen, wie gebrauchsfertige Lösungen, Suspensionen, Emulsionen, Pulver, Pasten und Granulate angewandt werden. Die Anwendung geschieht in üblicher Weise, z.B. durch Gießen, Spritzen, Sprühen, Streuen.

Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können sowohl vor als auch nach dem Auflaufen der Pflanzen appliziert werden. Sie können auch vor der Saat in den Boden eingearbeitet werden.

Die angewandte Wirkstoffmenge kann in einem größeren Bereich schwanken. Sie hängt im wesentlichen von der Art des gewünschten Effektes ab. Im allgemeinen

liegen die Aufwandmengen zwischen 1 g und 10 kg Wirkstoff pro Hektar Bodenfläche, vorzugsweise zwischen 5 g und 5 kg pro ha.

5 Die Herstellung und die Verwendung der erfindungsgemäßen Wirkstoffe geht aus den nachfolgenden Beispielen hervor.

Herstellungsbeispiele:Beispiel 1

5

Eine Mischung aus 1,64 g (5 mMol) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(3-chlor-4-carboxy-phenyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on, 0,62 g (5,5 mMol) 1-Ethyl-5-hydroxy-pyrazol und 40 ml Acetonitril wird bei Raumtemperatur (ca. 20°C) unter Rühren mit 1,13 g (5,5 mMol) Dicyclohexylcarbodiimid versetzt und die Reaktionsmischung wird 16 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Dann werden 1,0 g (10 mMol) Triethylamin und 0,2 g (2 mMol) Trimethylsilylcyanid dazu gegeben und die Mischung wird drei Tage bei Raumtemperatur gerührt. Anschließend werden 60 ml einer 2%igen wässrigen Natriumcarbonat-Lösung dazu gegeben und die Mischung wird drei Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Der ausgefallene Dicyclohexylharnstoff wird durch Absaugen abgetrennt und die Mutterlauge zweimal mit Diethylether geschüttelt. Die wässrige Phase wird unter Rühren durch Zugabe von konz. Salzsäure auf einen pH-Wert von ca. 1 eingestellt. Das sich hierbei abscheidende ölige Produkt wird mit Methylenchlorid extrahiert, die Extraktionslösung mit Magnesiumsulfat getrocknet und filtriert. Vom Filtrat wird das Lösungsmittel im Wasserstrahlvakuum sorgfältig abdestilliert.

15

20

Man erhält 1,5 g (72% der Theorie) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-[3-chlor-4-(1-ethyl-5-hydroxy-pyrazol-4-yl-carbonyl)-phenyl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als amorphes Produkt.

25

logP (bei pH≈2 bestimmt): 2,63.

Analog zu Beispiel 1 sowie entsprechend der allgemeinen Beschreibung des erfindungsgemäßen Herstellungsverfahrens können beispielsweise auch die in der nachstehenden Tabelle 1 aufgeführten Verbindungen der allgemeinen Formel (I) -
5 bzw. der Formeln (IA), (IB) oder (IC) - hergestellt werden.

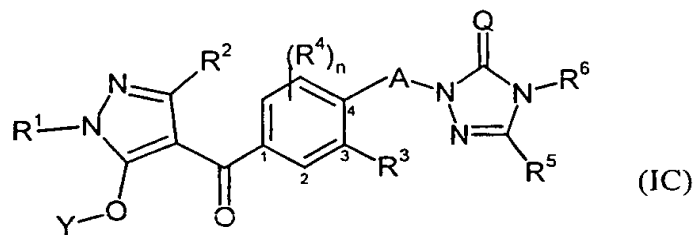
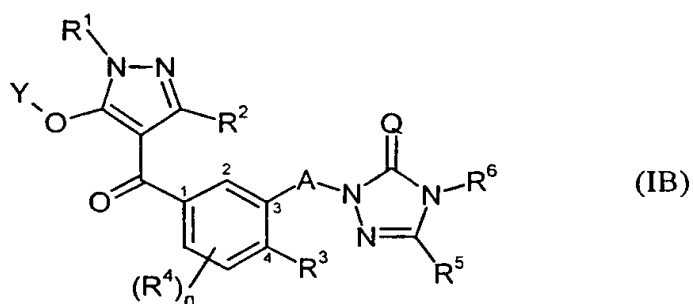
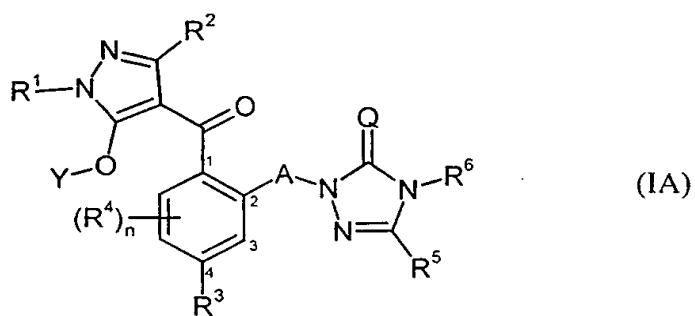



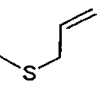













Tabelle 1: Beispiele für die Verbindungen der Formel (I), (IA), (IB), (IC)
Y steht hierbei jeweils für Wasserstoff



Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
2	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IA) logP = 2,34 ^{a)}
3	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	SCH ₃	CH ₃	(IA) logP = 2,22 ^{a)}
4	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	-	SCH ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,24 ^{a)}
5	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	SC ₂ H ₅	CH ₃	(IA) logP = 2,58 ^{a)}
6	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	SC ₃ H _{7-i}	CH ₃	(IA) logP = 2,90 ^{a)}
7	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	OCH ₃		(IA) logP = 2,28 ^{a)}
8	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	F	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃	(IA) logP = 1,61 ^{a)}
9	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	F	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃	(IA) logP = 1,32 ^{a)}
10	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	F	-	OCH ₃		(IA) logP = 1,50 ^{a)}
11	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	F	-	OC ₂ H ₅		(IA) logP = 1,80 ^{a)}
12	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Br	-		CH ₃	(IA) logP = 2,69 ^{a)}
13	-	O	C ₂ H ₅	H	H	(6-) CF ₃	CF ₃	CH ₃	(IB) logP = 2,83 ^{a)}
14	-	O	C ₂ H ₅	H	H	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IC) logP = 1,71 ^{a)}

Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
15	-	O	C ₂ H ₅	H	H	-	CF ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,95 ^{a)}
16	-	O	C ₂ H ₅	H	Cl	-	CF ₃	CH ₃	(IA) logP = 2,47 ^{a)}
17	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	CF ₃	CH ₃	(IB) logP = 2,30 ^{a)}
18	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,91 ^{a)}
19	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IB) logP = 2,01 ^{a)}
20	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl			(IB) logP = 2,14 ^{a)}
21	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,69 ^{a)}
22	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OC ₃ H _{7-i}	CH ₃	(IB) logP = 2,31 ^{a)}
23	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	CH ₃	(IB) logP = 2,33 ^{a)}
24	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	Br	CH ₃	(IB) logP = 1,81 ^{a)}
25	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	H	CH ₃	(IB) logP = 1,28 ^{a)}
26	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl		CH ₃	(IB) logP = 1,82 ^{a)}
27	-	O	C ₂ H ₅	H	Br	-	CF ₃	CH ₃	(IA) logP = 2,55 ^{a)}
28	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	CH ₃	(IB) logP = 1,77 ^{a)}
29	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,38 ^{a)}
30	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	R ⁵ + R ⁶ : (CH ₂) ₄	(vgl. R ⁵)	(IB) logP = 1,55 ^{a)}

Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
31	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OCH ₃		(IB) logP = 1,99 ^{a)}
32	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅		(IB) logP = 2,31 ^{a)}
33	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i		(IB) logP = 4,64 ^{a)}
34	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃		(IB) logP = 2,65 ^{a)}
35	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	SCH ₃		(IB) logP = 2,27 ^{a)}
36	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	CH ₃		(IB) logP = 1,64 ^{a)}
37	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂		(IB) logP = 2,04 ^{a)}
38	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) Cl	C ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(IB) logP = 2,16 ^{a)}
39	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	Cl	(2-) Cl	Br	CH ₃	(IB) logP = 1,52 ^{a)}
40	CH ₂	O	CH ₃	H	Cl	(2-) Cl	Br	CH ₃	(IB) logP = 1,53 ^{a)}
41	CH ₂	O	C ₂ H ₅	CH ₃	Cl	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,91 ^{a)}
42	CH ₂	O	C ₂ H ₅	CH ₃	Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IB) logP = 2,02 ^{a)}
43	CH ₂	O	C ₂ H ₅	CH ₃	Cl	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,71 ^{a)}
44	CH ₂	O	C ₂ H ₅	CH ₃	Cl	(2-) Cl	Br	CH ₃	(IB) logP = 1,81 ^{a)}
45	CH ₂	O	C ₂ H ₅	CH ₃	Cl	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,40 ^{a)}

Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
46	CH ₂	O	t- C ₄ H ₉	CH ₃	Cl	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 3,30 ^{a)}
47	CH ₂	O	t- C ₄ H ₉	CH ₃	Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IB) logP = 3,44 ^{a)}
48	CH ₂	O	t- C ₄ H ₉	CH ₃	Cl	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 3,02 ^{a)}
49	CH ₂	O	t- C ₄ H ₉	CH ₃	Cl	(2-) Cl	Br	CH ₃	(IB) logP = 3,19 ^{a)}
50	CH ₂	O	t- C ₄ H ₉	CH ₃	Cl	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IB) logP = 2,53 ^{a)}
51	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	Cl	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,66 ^{a)}
52	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IB) logP = 1,76 ^{a)}
53	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	Cl	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,48 ^{a)}
54	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	Cl	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,20 ^{a)}
55	CH ₂	O	CH ₃	H	Cl	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,67 ^{a)}
56	CH ₂	O	CH ₃	H	Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IB) logP = 1,77 ^{a)}
57	CH ₂	O	CH ₃	H	Cl	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,48 ^{a)}
58	CH ₂	O	CH ₃	H	Cl	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,19 ^{a)}
59	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	OCH ₃	(2-) NO ₂	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IC) logP = 1,99 ^{a)}
60	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	OCH ₃	(2-) NO ₂	SCH ₃	CH ₃	(IC) logP = 1,92 ^{a)}
61	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	SCH ₃	CH ₃	(IA-Na-Salz)

Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
62	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(2-) F	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,99 ^{a)}
63	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	H	CH ₃	(IA)
64	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	CH ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,80 ^{a)}
65	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	CH ₂ OCH ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,98 ^{a)}
66	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	OCH ₃	CH ₃	(IA) logP = 2,27 ^{a)}
67	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	-	CF ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,60 ^{a)}
68	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	-	OCH ₂ CF ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,73 ^{a)}
69	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	F	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,27 ^{a)}
70	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	F	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,76 ^{a)}
71	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	F	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,55 ^{a)}
72	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	F	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	CH ₃	(IB) logP = 1,62 ^{a)}
73	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) Fp.: 204°C
74	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) Fp.: 183°C
75	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	CH ₃	(IB) Fp.: 192°C
76	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IB) Fp.: 200°C
77	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃		(IB) Fp.: 205°C

Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
78	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃		(IB) Fp.: 233°C
79	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃		(IB) Fp.: 223°C
80	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(IB) Fp.: 163°C

Analog zu Beispiel 1 sowie entsprechend der allgemeinen Beschreibung des erfindungsgemäßen Herstellungsverfahrens können beispielsweise auch die in der nachstehenden Tabelle 2 aufgeführten Verbindungen der allgemeinen Formel (I) – bzw. der Formel (ID) - hergestellt werden.

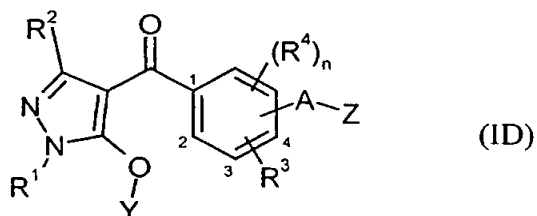
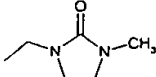
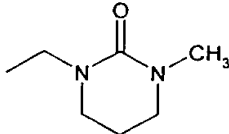
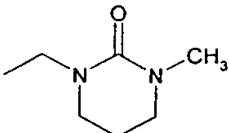
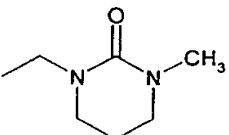
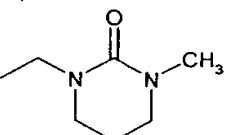
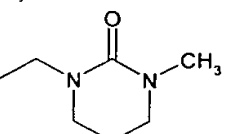
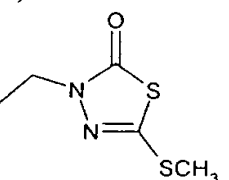
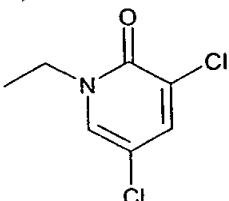
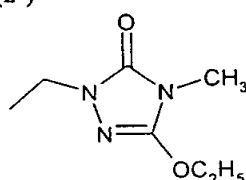
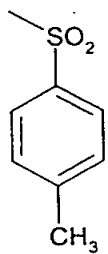
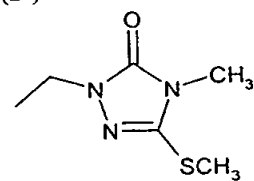
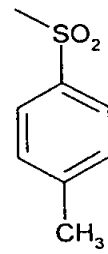
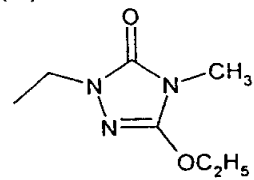
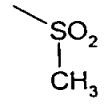
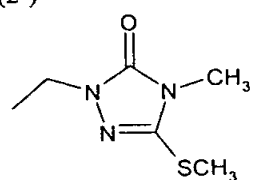
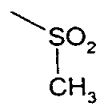
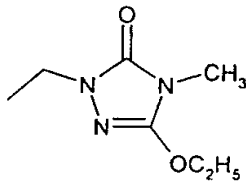
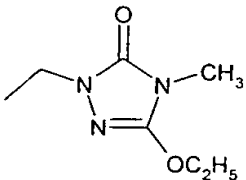
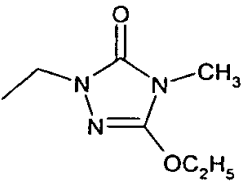
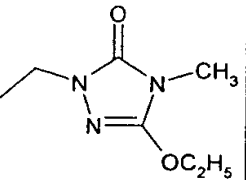
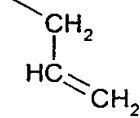
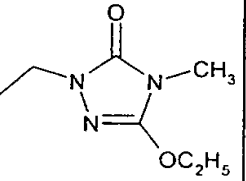
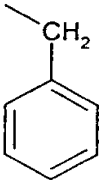
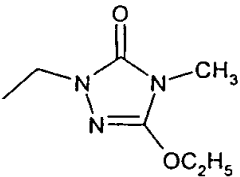
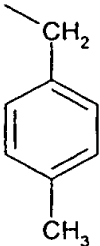
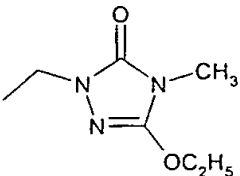
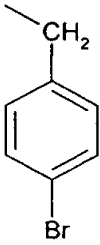
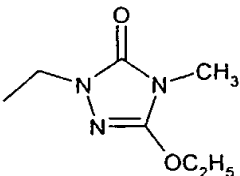
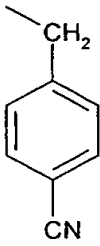
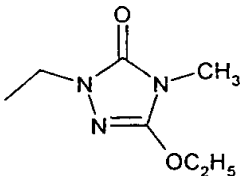
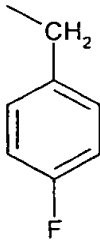
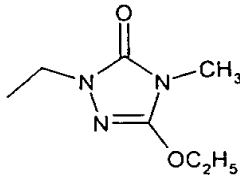
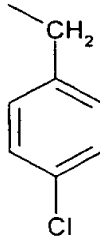


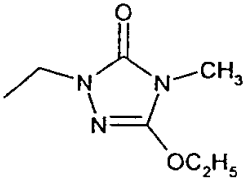
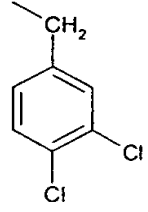
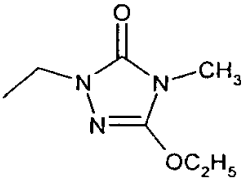
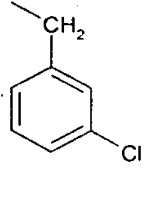
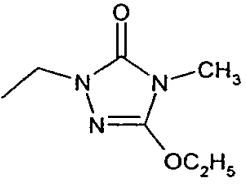
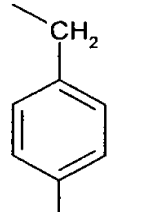
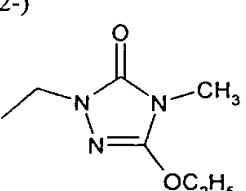
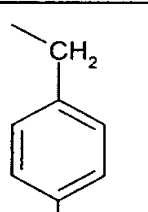
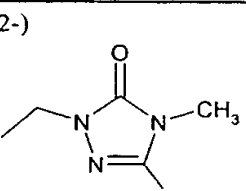
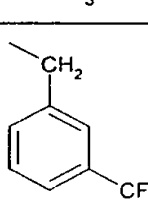
Tabelle 2: Weitere Beispiele für die Verbindungen der Formel (I)

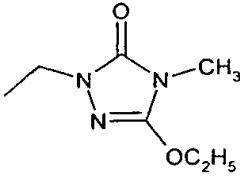
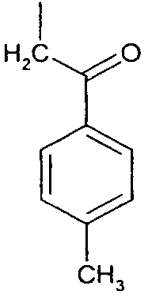
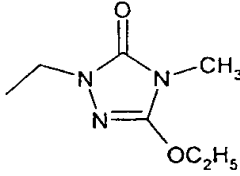
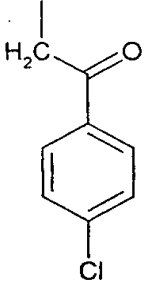
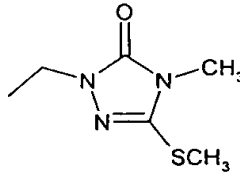
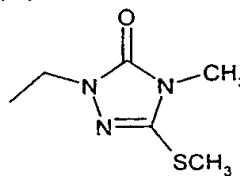
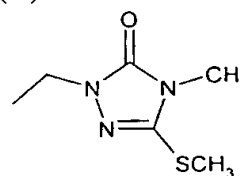
Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-1	C ₂ H ₅	H	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,64 ^{a)}
ID-2	C ₂ H ₅	H	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,77 ^{a)}
ID-3	CH ₃	H	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,52 ^{a)}
ID-4	CH ₃	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,50 ^{a)}
ID-5	C ₂ H ₅	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,72 ^{a)}
ID-6	t-C ₄ H ₉	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 3,01 ^{a)}
ID-7	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	H	logP = 2,98 ^{a)}

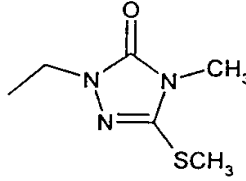
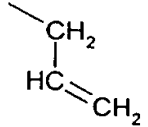
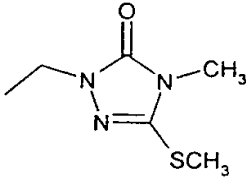
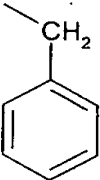
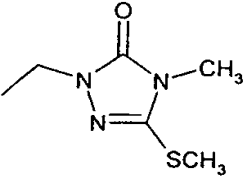
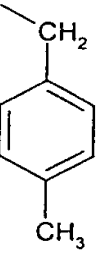
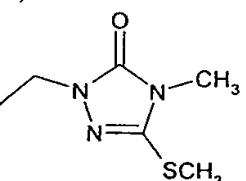
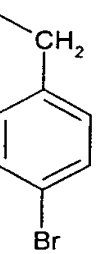
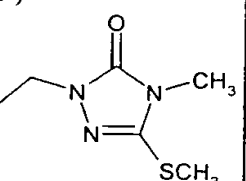
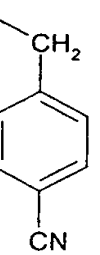
Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-8	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	H	logP = 2,75 ^{a)}
ID-9	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,82 ^{a)}
ID-10	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,73 ^{a)}
ID-11	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,25 ^{a)}
ID-12	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 2,82 ^{a)}

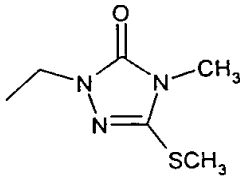
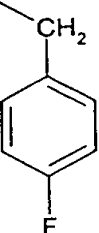
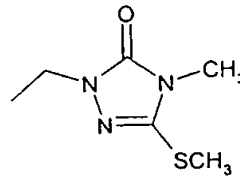
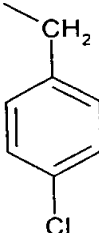
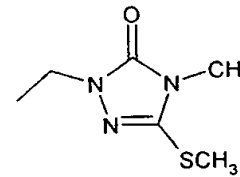
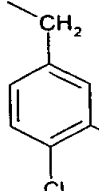
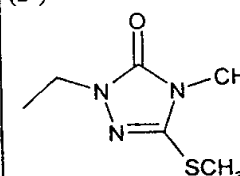
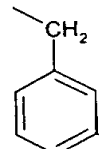
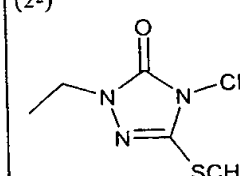
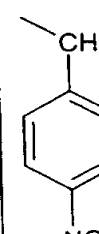
Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-13	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	CH ₃	logP = 2,74 ^{a)}
ID-14	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	C ₂ H ₅	logP = 2,82 ^{a)}
ID-15	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	i-C ₃ H ₇	logP = 3,11 ^{a)}
ID-16	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 2,99 ^{a)}
ID-17	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,45 ^{a)}

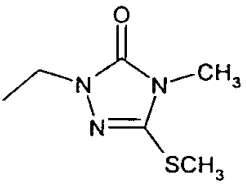
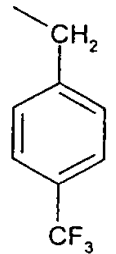
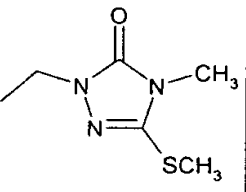
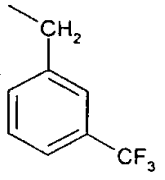
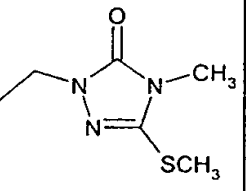
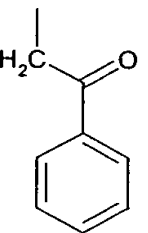
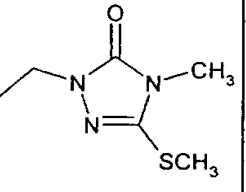
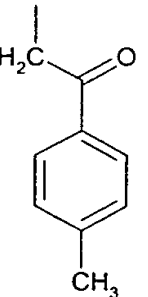
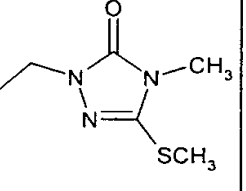
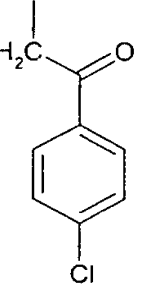
Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-18	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,79 ^{a)}
ID-19	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,97 ^{a)}
ID-20	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,12 ^{a)}
ID-21	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,49 ^{a)}
ID-22	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,85 ^{a)}

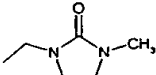
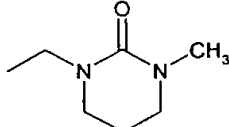
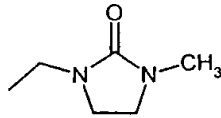
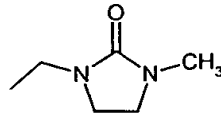
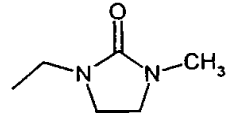
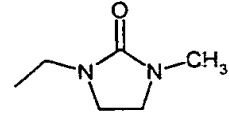
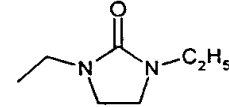
Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-23	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 4,26 ^{a)}
ID-24	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,84 ^{a)}
ID-25	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,33 ^{a)}
ID-26	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,98 ^{a)}
ID-27	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,94 ^{a)}

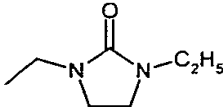
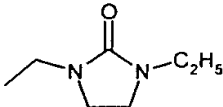
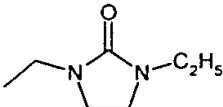
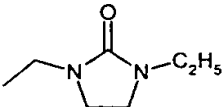
Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-28	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,57 ^{a)}
ID-29	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,75 ^{a)}
ID-30	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	CH ₃	logP = 2,65 ^{a)}
ID-31	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	C ₂ H ₅	logP = 2,71 ^{a)}
ID-32	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 	i-C ₃ H ₇	logP = 3,00 ^{a)}

Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-33	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 2,89 ^{a)}
ID-34	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,37 ^{a)}
ID-35	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,71 ^{a)}
ID-36	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,89 ^{a)}
ID-37	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,06 ^{a)}

Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-38	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,41 ^{a)}
ID-39	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,78 ^{a)}
ID-40	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 4,17 ^{a)}
ID-41	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,76 ^{a)}
ID-42	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,26 ^{a)}

Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-43	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,89 ^{a)}
ID-44	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,85 ^{a)}
ID-45	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,19 ^{a)}
ID-46	C ₂ H ₅	H	(4-) CF ₃	-	(2-) 		logP = 3,47 ^{a)}
ID-47	C ₂ H ₅	H	(4-) CF	-	(2-) 		logP = 3,64 ^{a)}

Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-48	C ₂ H ₅	H	(2-) OCH ₃	(4-) Cl	(3-) 	H	
ID-49	C ₂ H ₅	H	(2-) OCH ₃	(4-) Cl	(3-) 	H	
ID-50	CH ₃	H	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,41 ^{a)}
ID-51	CH ₃	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,38 ^{a)}
ID-52	C ₂ H ₅	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,56 ^{a)}
ID-53	t-C ₄ H ₉	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 2,79 ^{a)}
ID-54	CH ₃	H	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,62 ^{a)}

Bsp.- Nr.	R ¹	R ²	(Position -) R ³	(Position -) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Y	Physikal. Daten
ID-55	CH ₃	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,57 ^{a)}
ID-56	C ₂ H ₅	H	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,88 ^{a)}
ID-57	C ₂ H ₅	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 1,79 ^{a)}
ID-58	t-C ₄ H ₉	CH ₃	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	H	logP = 3,15 ^{a)}

Die Bestimmung der in den Tabellen 1 und 2 angegebenen logP-Werte erfolgte gemäß EEC-Directive 79/831 Annex V.A8 durch HPLC (High Performance Liquid Chromatography) an einer Phasenumkehrsäule (C 18). Temperatur: 43°C.

5

(a) Eluenten für die Bestimmung im sauren Bereich: 0,1% wässrige Phosphorsäure, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit ^{a)} markiert.

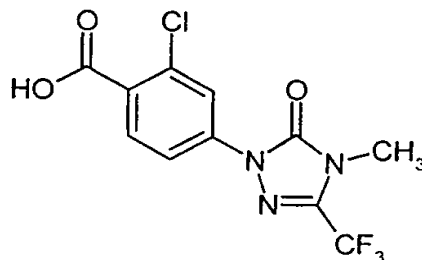
10

(b) Eluenten für die Bestimmung im neutralen Bereich: 0,01-molare wässrige Phosphatpuffer-Lösung, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit ^{b)} markiert.

Die Eichung erfolgte mit unverzweigten Alkan-2-onen (mit 3 bis 16 Kohlenstoffatomen), deren logP-Werte bekannt sind (Bestimmung der logP-Werte anhand der Retentionszeiten durch lineare Interpolation zwischen zwei aufeinanderfolgenden Alkanonen).

5

Die lambda-max-Werte wurden an Hand der UV-Spektren von 200 nm bis 400 nm in den Maxima der chromatographischen Signale ermittelt.

Ausgangsstoffe der Formel (III):Beispiel (III-1)

5

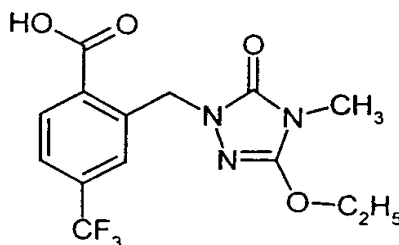
4,5 g (15 mMol) 2-(3-Chlor-4-cyano-phenyl)-4-methyl-5-trifluormethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 80 ml 60%iger Schwefelsäure aufgenommen und die Mischung wird 6 Stunden unter Rückfluss erhitzt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wird das kristallin angefallene Produkt durch Absaugen isoliert.

10

Man erhält 4,5 g (91% der Theorie) 2-(3-Carboxy-4-chlor-phenyl)-4-methyl-5-trifluormethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on vom Schmelzpunkt 223°C.

Beispiel (III-2)

15



20

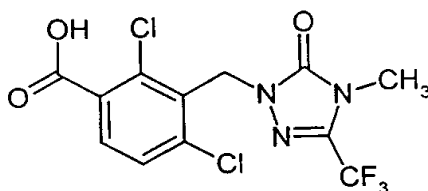
2 g (4,9 mMol) 5-Brom-4-methyl-2-(2-ethoxycarbonyl-5-trifluormethyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on (vgl. Beispiel IV-1) werden in 30 ml 10%iger ethanolischer Kalilauge gelöst und 2 Stunden unter Rückfluss erhitzt. Das Reaktionsgemisch wird im Wasserstrahlvakuum eingeeengt, in 20 ml Wasser aufgenommen und

mit verdünnter Salzsäure angesäuert. Der ausfallende Feststoff wird filtriert und getrocknet.

Man erhält 1,2 g (71% der Theorie) 5-Ethoxy-4-methyl-2-(2-carboxy-5-trifluor-
methyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als festes Produkt.

logP: 2,18^a)

Beispiel (III-3)



10

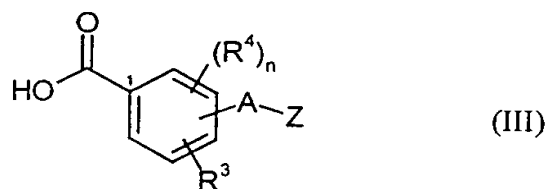
13,4 g (35 mMol) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(2,6-dichlor-3-methoxycarbonyl-
benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 60 ml 1,4-Dioxan vorgelegt und
eine Lösung von 1,54 g (38,5 mMol) Natriumhydroxid in 20 ml Wasser wird bei
Raumtemperatur langsam eindosiert. Die Reaktionsmischung wird 150 Minuten bei
60°C gerührt und anschließend im Wasserstrahlvakuum eingeeengt. Der Rückstand
wird in 100 ml Wasser gelöst und durch Zugabe von konz. Salzsäure wird der pH-
Wert der Lösung auf 1 eingestellt. Das hierbei kristallin angefallene Produkt wird
durch Absaugen isoliert.

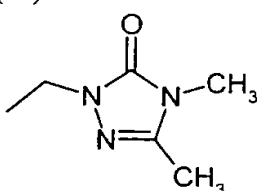
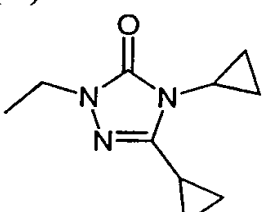
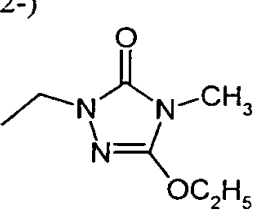
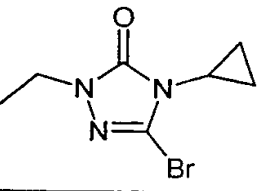
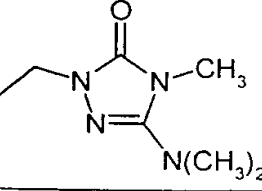
20

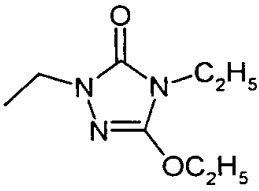
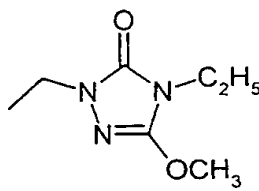
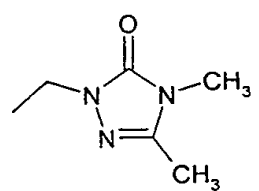
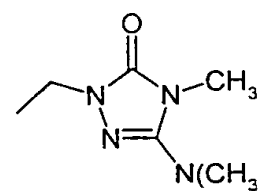
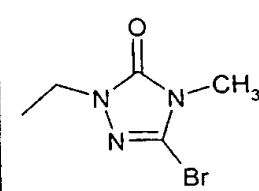
Man erhält 11,7 g (90% der Theorie) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(2,6-dichlor-3-
carboxy-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on vom Schmelzpunkt 207°C.

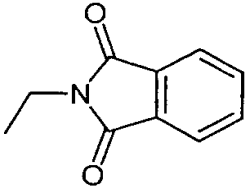
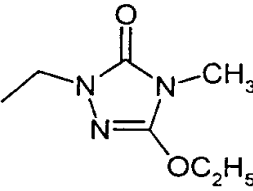
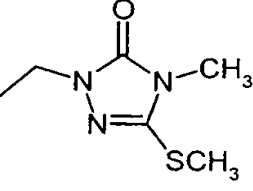
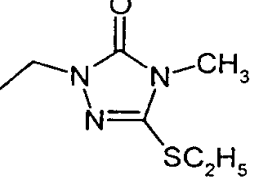
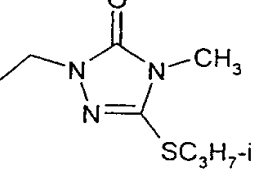
Analog zu den Beispielen (III-1) bis (III-3) können beispielsweise auch die in der
nachstehenden Tabelle 3 aufgeführten Verbindungen der allgemeinen Formel (III)
hergestellt werden.

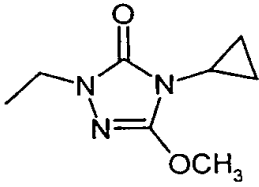
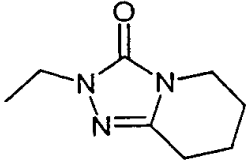
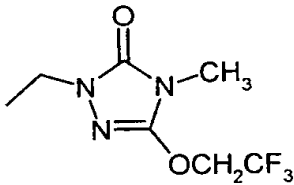
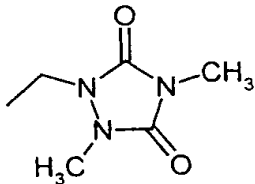
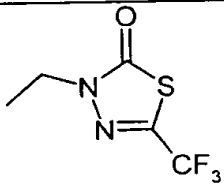
25

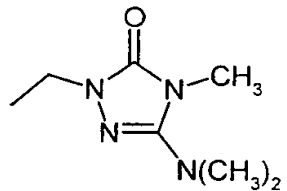
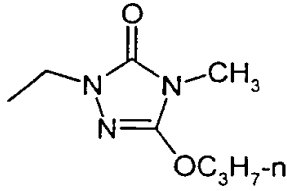
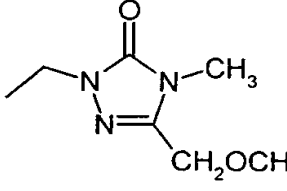
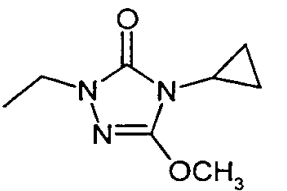
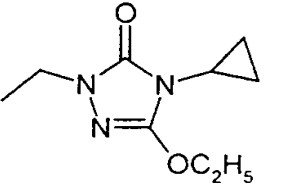
**Tabelle 32:** Beispiele für die Verbindungen der Formel (III)

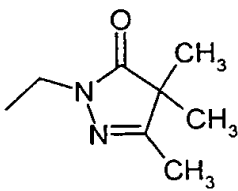
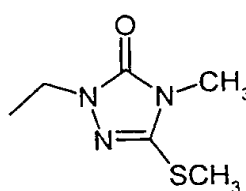
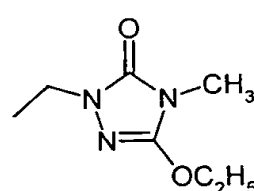
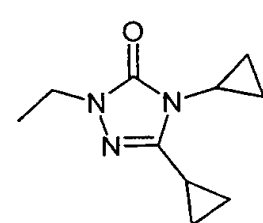
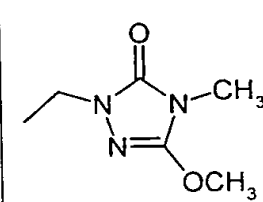
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-4	(4-) Cl	-	(2-) 	logP = 1,39 ^{a)}
III-5	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(3-) 	logP = 1,47 ^{a)}
III-6	(4-) F	-	(2-) 	logP = 1,73 ^{a)}
III-7	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,65 ^{a)}
III-8	(4-) Br	-	(2-) 	logP = 1,74 ^{a)}

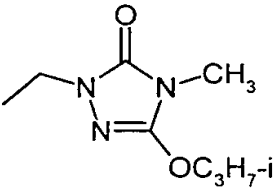
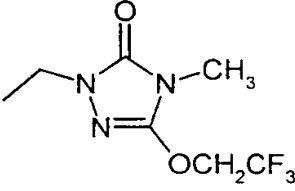
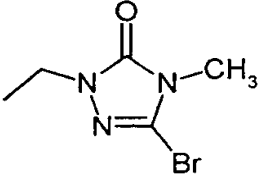
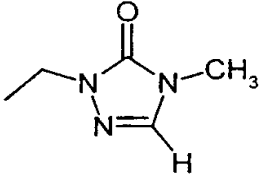
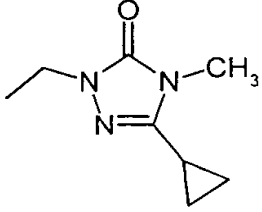
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-9	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,43 ^{a)}
III-10	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,12 ^{a)}
III-11	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,61 ^{a)}
III-12	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,93 ^{a)}
III-13	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,01 ^{a)}

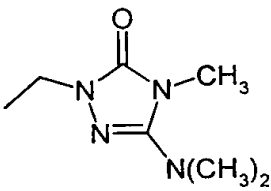
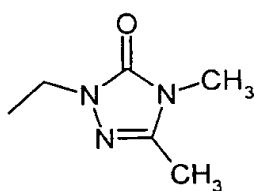
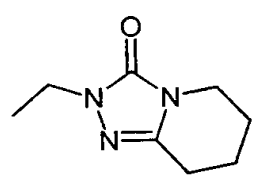
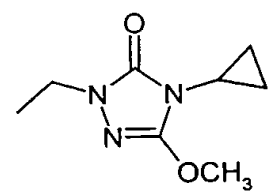
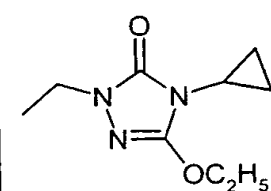
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-14	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 1,77^a)$
III-15	(3-) CH_3	-	(2-) 	$\log P = 1,70^a)$
III-16	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	$\log P = 1,07^a)$
III-17	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 2,35^a)$
III-18	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 2,63^a)$

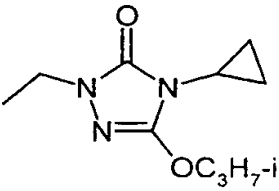
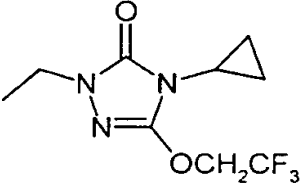
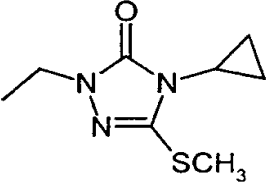
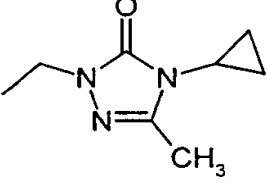
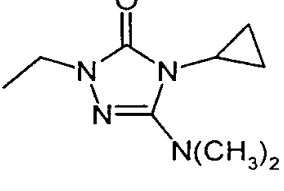
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-19	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,13 ^{a)}
III-20	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,82 ^{a)}
III-21	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,48 ^{a)}
III-22	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,73 ^{a)}
III-23	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 3,11 ^{a)}

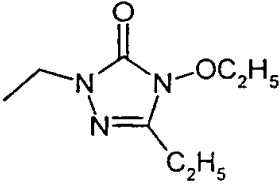
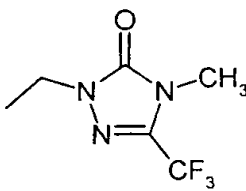
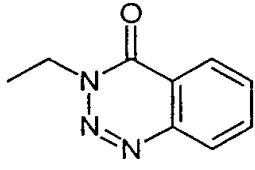
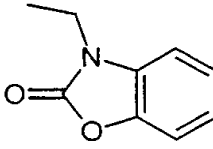
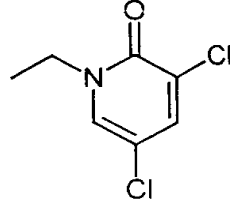
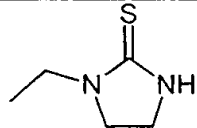
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-24	(4-) F	-	(2-) 	logP = 1,43 ^{a)}
III-25	(4-) F	-	(2-) 	logP = 1,97 ^{a)}
III-26	(4-) F	-	(2-) 	logP = 1,30 ^{a)}
III-27	(4-) F	-	(2-) 	logP = 1,63 ^{a)}
III-28	(4-) F	-	(2-) 	logP = 1,93 ^{a)}

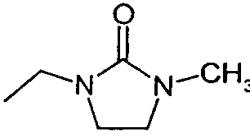
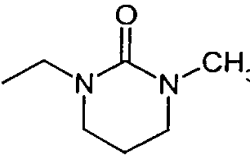
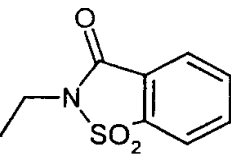
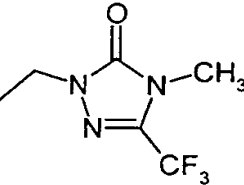
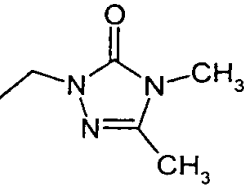
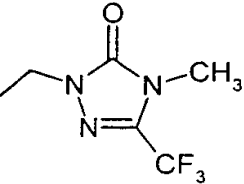
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-29	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,78 ^{a)}
III-30	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 230°C logP = 1,63 ^{a)}
III-31	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 190°C logP = 1,73 ^{a)}
III-32	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 210°C logP = 1,87 ^{a)}
III-33	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 210°C logP = 1,43 ^{a)}

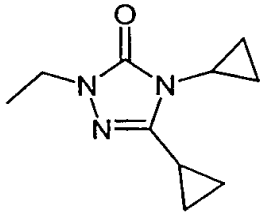
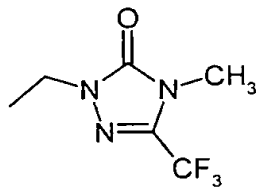
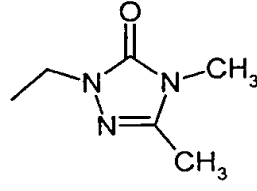
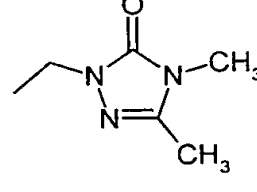
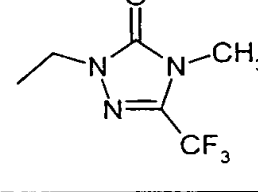
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-34	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 164°C logP = 2,01 ^{a)}
III-35	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 168°C logP = 2,04 ^{a)}
III-36	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 218°C logP = 1,53 ^{a)}
III-37	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 259°C logP = 0,98 ^{a)}
III-38	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 210°C logP = 1,56 ^{a)}

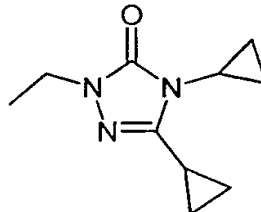
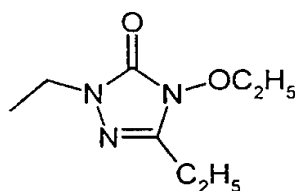
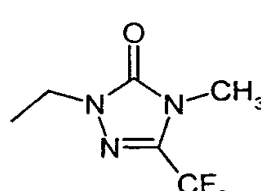
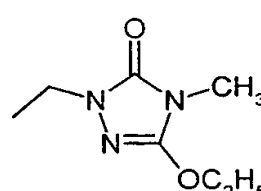
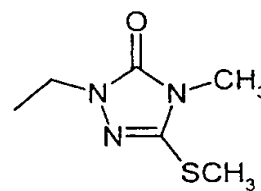
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-39	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 197°C logP = 1,51 ^{a)}
III-40	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 262°C logP = 1,11 ^{a)}
III-41	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 249°C logP = 1,30 ^{a)}
III-42	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 200°C logP = 1,71 ^{a)}
III-43	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 189°C logP = 2,01 ^{a)}

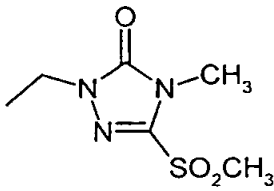
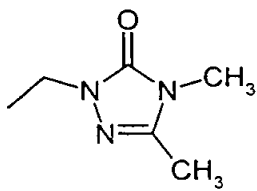
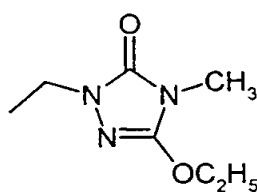
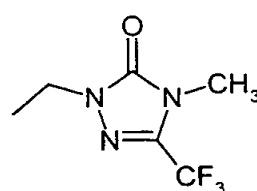
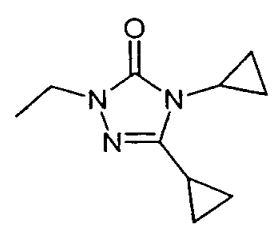
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-44	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 178°C logP = 2,28 ^{a)}
III-45	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 161°C logP = 2,31 ^{a)}
III-46	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 200°C logP = 1,98 ^{a)}
III-47	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 201°C logP = 1,39 ^{a)}
III-48	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 207°C logP = 1,77 ^{a)}

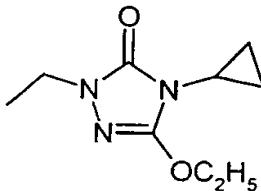
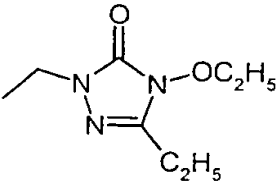
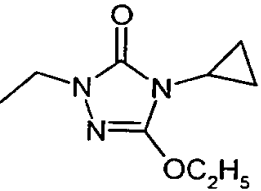
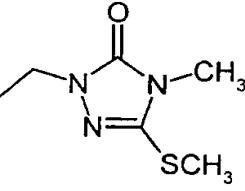
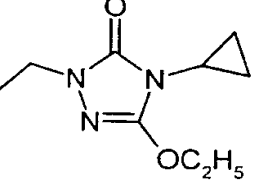
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-49	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 140°C logP = 1,88 ^{a)}
III-50	(4-) OCH ₂ CHF ₂	-	(2-) 	Fp.: 154°C logP = 2,14 ^{a)}
III-51	-	-	(2-) 	Fp.: 214°C logP = 1,87 ^{a)}
III-52	-	-	(2-) 	Fp.: 194°C logP = 2,07 ^{a)}
III-53	-	-	(2-) 	Fp.: 181°C logP = 1,97 ^{a)}
III-54	-	-	(2-) 	Fp.: 251°C logP = 1,14 ^{a)}

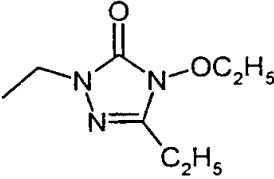
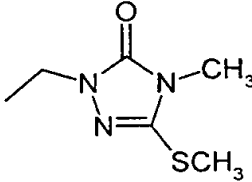
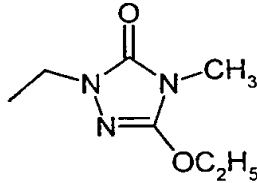
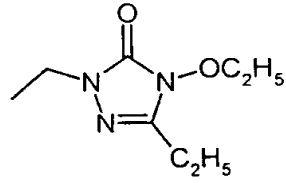
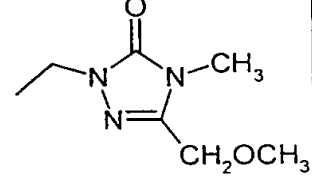
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-55	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	logP = 1,38 ^{a)}
III-56	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	logP = 1,48 ^{a)}
III-57	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	
III-58	(4-) Cl	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,42 ppm.
III-59	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,48 ppm.
III-60	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,60 ppm. logP = 2,47 ^{a)}

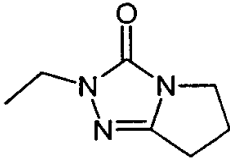
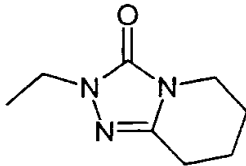
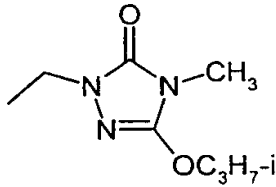
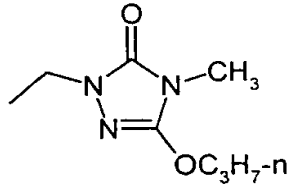
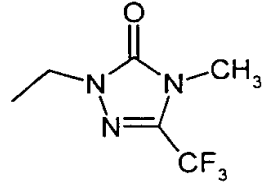
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-61	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,33 ^{a)}
III-62	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5.14 ppm.
III-63	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,27 ppm.
III-64	(4-) Cl	-	(3-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,12 ppm.
III-65	(4-) Cl	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5.20 ppm.

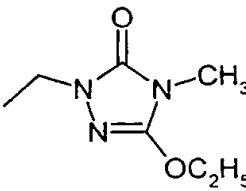
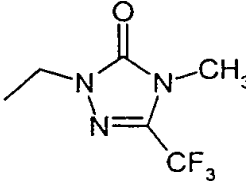
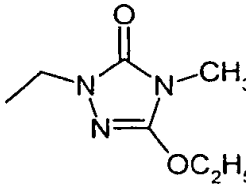
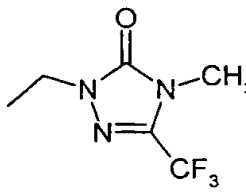
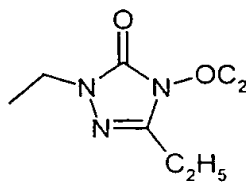
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-66	(4-) Cl	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,03 ppm.
III-67	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,24 ppm.
III-68	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,39 ppm.
III-69	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,19 ppm.
III-70	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,30 ppm.

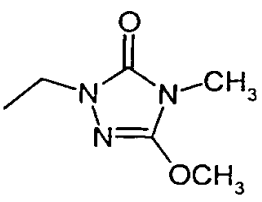
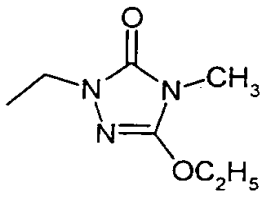
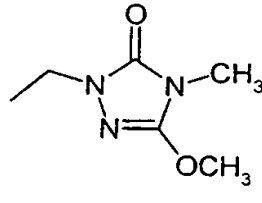
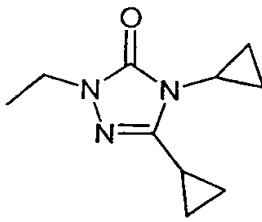
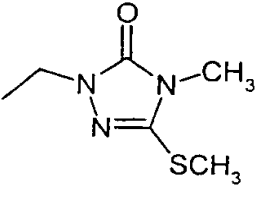
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-71	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,43 ppm.
III-72	(4-) Br	-	(3-) 	¹ H-NMR, (CDCl ₃ , δ): 5,10 ppm.
III-73	(4-) Br	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,03 ppm.
III-74	(4-) Br	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,19 ppm.
III-75	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,01 ppm.

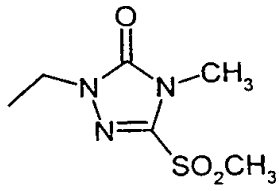
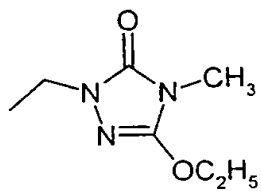
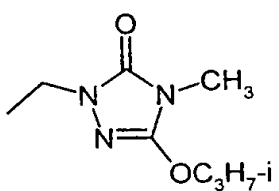
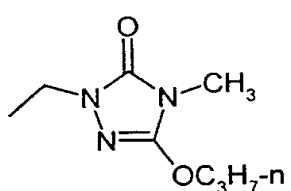
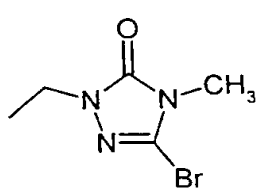
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-76	(4-) Cl	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,14 ppm.
III-77	(4-) Cl	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,25 ppm.
III-78	(4-) NO ₂	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,23 ppm.
III-79	(4-) NO ₂	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,37 ppm.
III-80	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,46 ^{a)}

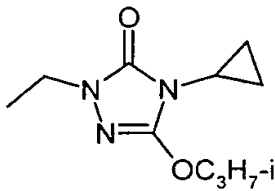
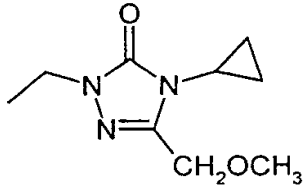
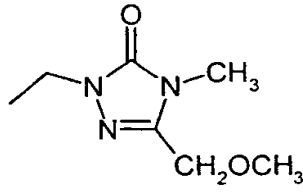
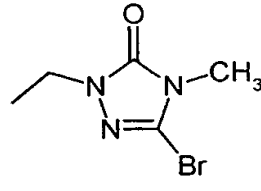
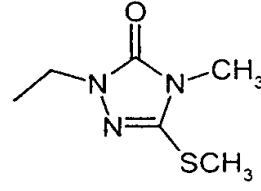
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-81	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,31 ppm.
III-82	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,08 ^{a)}
III-83	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,38 ppm.
III-84	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,43 ppm.
III-85	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,47 ppm.

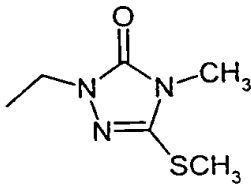
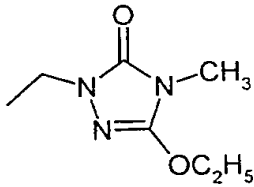
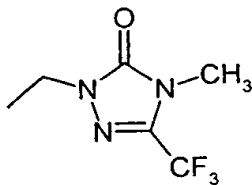
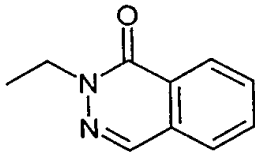
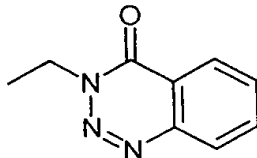
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-86	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 1,44^a)$
III-87	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 1,63^a)$
III-88	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 2,27^a)$
III-89	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 2,31^a)$
III-90	-	-	(2-) 	$\log P = 1,82^a)$

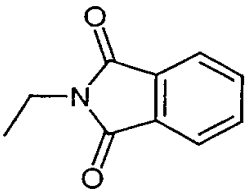
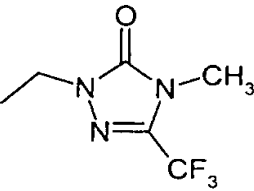
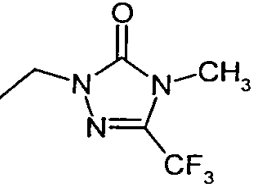
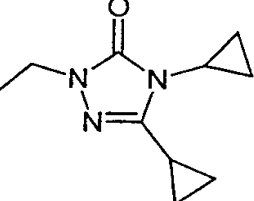
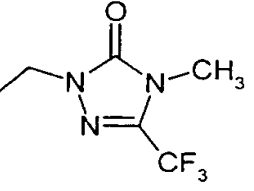
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-91	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,32 ppm.
III-92	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,53 ppm.
III-93	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,39 ppm.
III-94	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,57 ppm.
III-95	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,44 ppm.

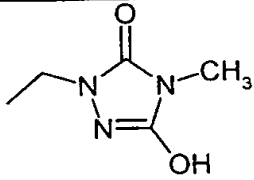
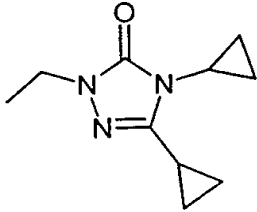
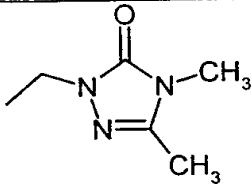
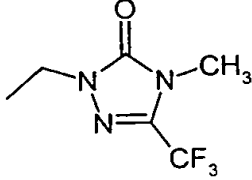
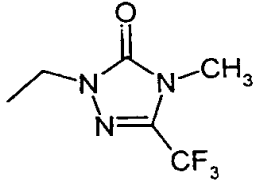
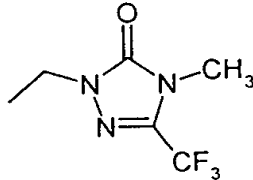
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-96	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,41 ppm.
III-97	-	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,34 ppm.
III-98	-	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,38 ppm.
III-99	-	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,26 ppm.
III-100	-	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,43 ppm.

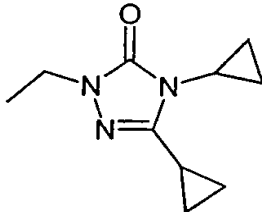
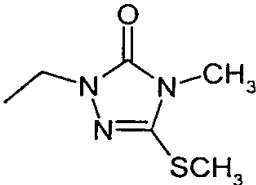
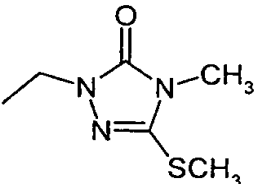
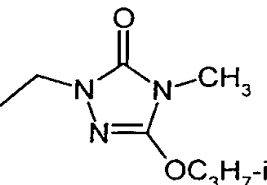
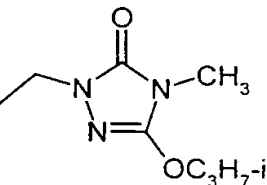
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-101	-	-	(2-) 	logP = 1,23 ^{a)}
III-102	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	logP = 1,14 ^{a)}
III-103	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,45 ^{a)}
III-104	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,48 ^{a)}
III-105	(4-) Br	-	(2-) 	logP = 1,85 ^{a)}

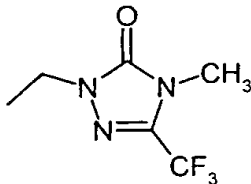
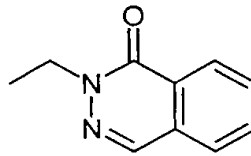
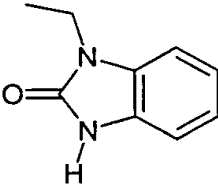
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-106	(4-) CF ₃	-	(3-) 	logP = 2,74 ^{a)}
III-107	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,01 ^{a)}
III-108	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,79 ^{a)}
III-109	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,65 ^{a)}
III-110	(4-) Br	-	(2-) 	logP = 1,90 ^{a)}

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-111	(4-) Cl	-	(2-) 	logP = 1,83 ^{a)}
III-112	(4-) I	-	(2-) 	logP = 2,06 ^{a)}
III-113	(4-) I	-	(2-) 	Fp.: 104°C logP = 2,39 ^{a)}
III-114	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 191°C
III-115	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 213°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-116	-	-	(2-) 	
III-117	-	-	(2-) 	Fp.: 112°C
III-118	(4-) CF_3	-	(2-) 	Fp.: 158°C
III-119	(4-) CF_3	-	(2-) 	Fp.: 162°C
III-120	(4-) Cl	(5-) Cl	(2-) 	Fp.: 167°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-121	-	-		Fp.: 188°C
III-122	-	-	(2-) 	
III-123	-	-		Fp.: 131°C
III-124	(4-) Cl	-	(2-) 	Fp.: 109°C
III-125	(4-) I	-	(2-) 	Fp.: 104°C
III-126	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 99°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-127	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 174°C
III-128	-	-	(2-) 	Fp.: 122°C
III-129	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 164°C
III-130	-	-	(2-) 	Fp.: 154°C
III-131	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 161°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-132	(4-) CN	-	(2-) 	Fp.: 196°C
III-133	-	-	(2-) 	Fp.: 192°C
III-134	-	-		

Die Bestimmung der in Tabelle 3 angegebenen logP-Werte erfolgte gemäß EEC-Directive 79/831 Annex V.A8 durch HPLC (High Performance Liquid Chromatography) an einer Phasenumkehrsäule (C 18). Temperatur: 43°C.

5

(a) Eluenten für die Bestimmung im sauren Bereich: 0,1% wässrige Phosphorsäure, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit a) markiert.

10

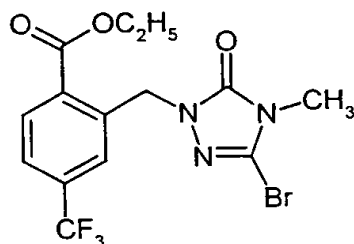
(b) Eluenten für die Bestimmung im neutralen Bereich: 0,01-molare wässrige Phosphatpuffer-Lösung, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit b) markiert.

15

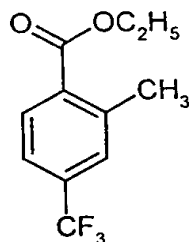
Die Eichung erfolgte mit unverzweigten Alkan-2-onen (mit 3 bis 16 Kohlenstoffatomen), deren logP-Werte bekannt sind (Bestimmung der logP-Werte anhand der

Retentionszeiten durch lineare Interpolation zwischen zwei aufeinanderfolgenden Alkanonen).

5 Die lambda-max-Werte wurden an Hand der UV-Spektren von 200 nm bis 400 nm in den Maxima der chromatographischen Signale ermittelt.

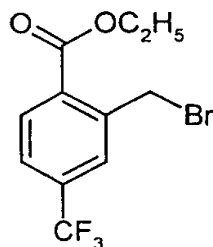
Ausgangsstoffe der Formel (IV):Beispiel (IV-1)

5

Stufe 1

- 10 10 g (49 mMol) 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure werden in 150 ml Ethanol gelöst und mit 1 ml konz. Schwefelsäure versetzt. Nach 24 Stunden Erhitzen unter Rückfluss wird die Lösung eingeeengt, in Methylenchlorid aufgenommen und mit gesättigter wässriger Natriumhydrogencarbonat-Lösung extrahiert. Die Methylenchlorid-Phase wird über Natriumsulfat getrocknet und im Wasserstrahlvakuum eingeeengt.
- 15

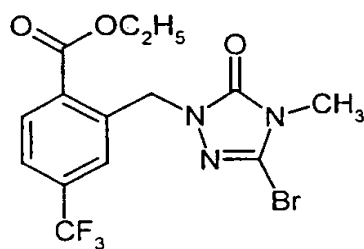
Man erhält 9 g (80% der Theorie) 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester als amorphen Rückstand.

Stufe 2

5 9 g (39 mMol) 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester werden in 200 ml Tetrachlormethan gelöst und mit 7 g (39 mMol) *N*-Brom-succinimid und 0.1 g Dibenzoylperoxid versetzt. Nach 6 Stunden Erhitzen unter Rückfluss wird das abgeschiedene Succinimid abfiltriert und das Filtrat im Wasserstrahlvakuum eingeeengt.

10 Man erhält 12 g eines amorphen Rückstandes, der neben 2-Brommethyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester noch 17 % 2,2-Dibrommethyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester und 12% 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester enthält.

15 Stufe 3



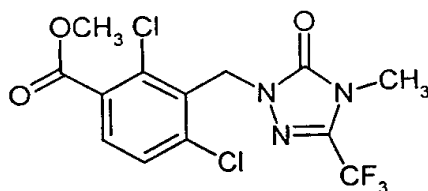
20 4 g 2-Brommethyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester (ca. 70%ig) und 2.28 g (12,8 mMol) 5-Brom-4-methyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 150 ml Acetonitril gelöst, mit 5.3 g (38,4 mMol) Kaliumcarbonat versetzt und unter kräftigem Rühren 2 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Das Reaktionsgemisch wird in Wasser aufgenommen und mit Methylenchlorid mehrfach extrahiert. Die gesammelten

Methylenchlorid-Phasen werden über Natriumsulfat getrocknet, im Wasserstrahlvakuum eingeeengt und chromatographiert.

Man erhält 2 g (38 % der Theorie) 5-Brom-4-methyl-2-(2-ethoxycarbonyl-5-trifluoromethyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als amorphes Produkt.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , δ): 5,46 ppm.

Beispiel (IV-2)



6,7 g (40 mMol) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 150 ml Acetonitril vorgelegt und mit 11 g (80 mMol) Kaliumcarbonat verrührt. Nach Erwärmen der Mischung auf 50°C wird dann eine Lösung von 13,1 g (44 mMol) 3-Brommethyl-2,4-dichlor-benzoesäure-methylester in 20 ml Acetonitril unter Rühren tropfenweise dazu gegeben und die Reaktionsmischung wird noch 15 Stunden unter Rühren zum Rückfluss erhitzt. Anschließend wird im Wasserstrahlvakuum eingeeengt, der Rückstand in Methylenchlorid aufgenommen, mit 1N-Salzsäure gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und filtriert. Das Filtrat wird unter vermindertem Druck eingeeengt, der Rückstand mit Petrolether digeriert und das kristallin angefallene Produkt durch Absaugen isoliert.

Man erhält 14,9 g (97% der Theorie) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(2,6-dichlor-3-methoxycarbonyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on vom Schmelzpunkt 109°C.

Analog zu den Beispielen (IV-1) und (IV-2) können beispielsweise auch die in der nachstehenden Tabelle 4 aufgeführten Verbindungen der allgemeinen Formel (IV) hergestellt werden.

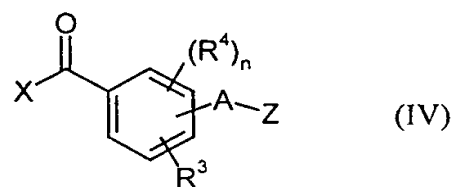
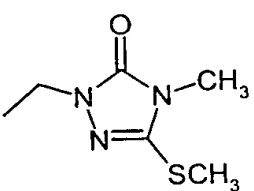
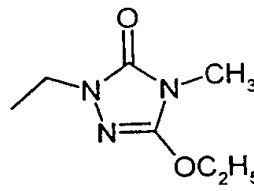
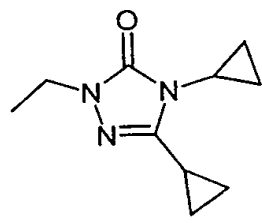
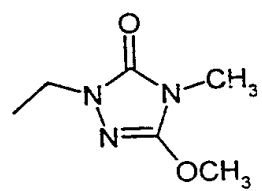
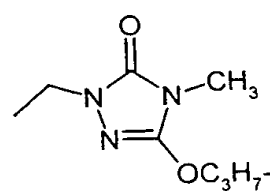
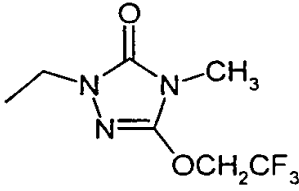
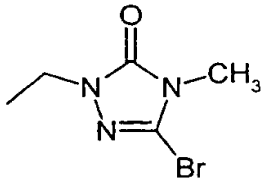
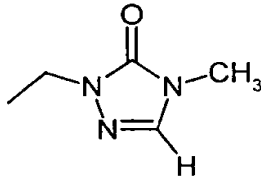
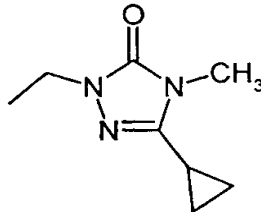
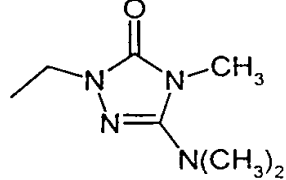
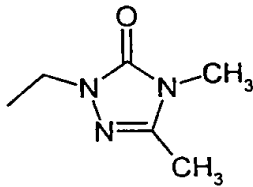
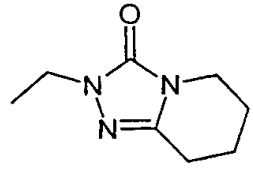
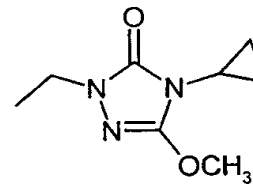
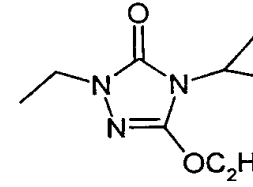
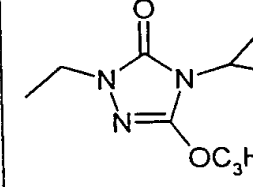
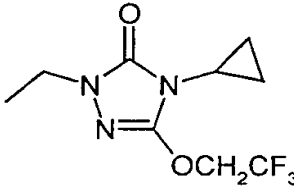
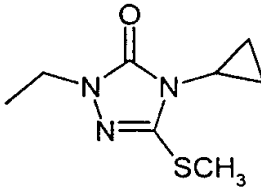
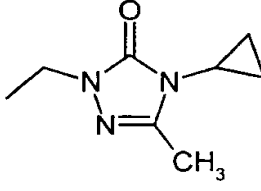
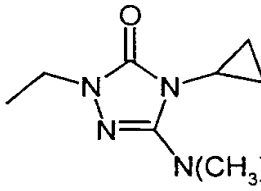
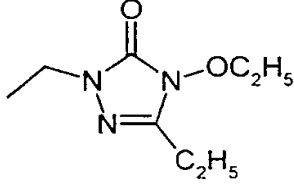


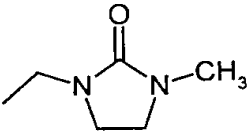
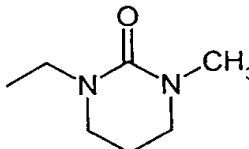
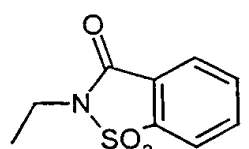
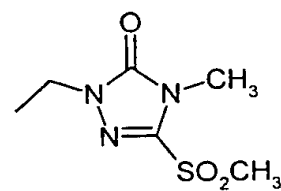
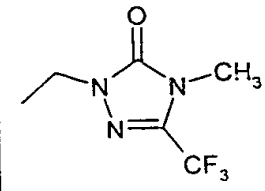
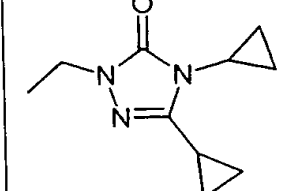
Tabelle 4: Beispiele für die Verbindungen der Formel (IV)

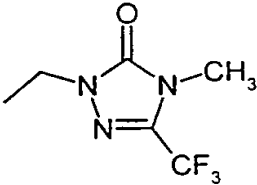
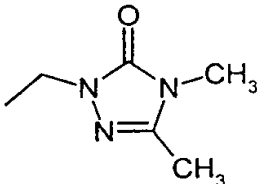
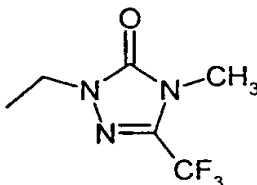
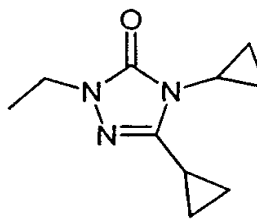
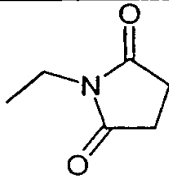
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-3	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 229°C logP = 2,27 ^{a)}
IV-4	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 120°C logP = 2,38 ^{a)}
IV-5	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 127°C logP = 2,55 ^{a)}
IV-6	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 121°C logP = 2,04 ^{a)}
IV-7	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 68°C logP = 2.73 ^{a)}

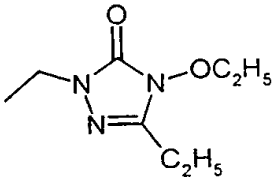
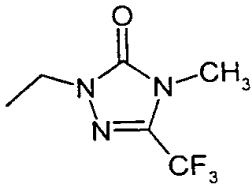
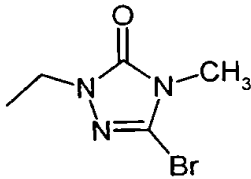
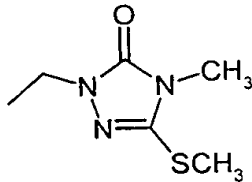
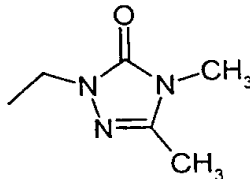
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-8	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 129°C logP = 2,72 ^{a)}
IV-9	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 164°C logP = 2,18 ^{a)}
IV-10	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 158°C logP = 1,55 ^{a)}
IV-11	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 106°C logP = 2,16 ^{a)}
IV-12	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 126°C logP = 2,11 ^{a)}

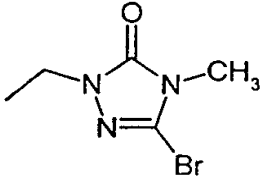
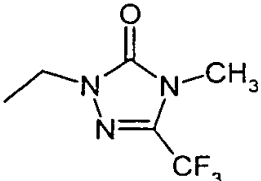
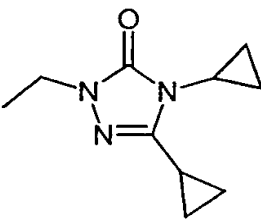
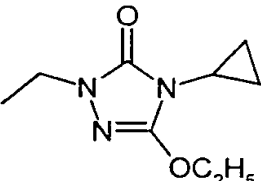
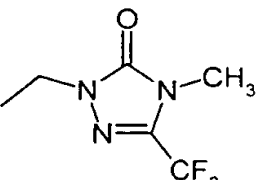
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-13	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 146°C logP = 1,65 ^{a)}
IV-14	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 178°C logP = 1,86 ^{a)}
IV-15	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 97°C logP = 2,36 ^{a)}
IV-16	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 99°C logP = 2,73 ^{a)}
IV-17	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 56°C logP = 3,08 ^{a)}

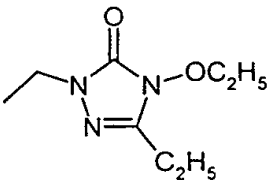
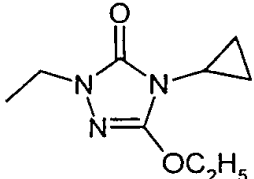
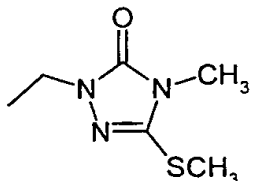
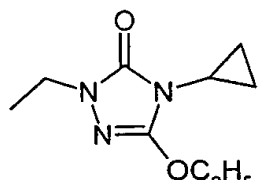
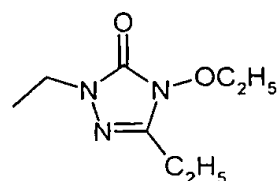
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-18	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 102°C logP = 3,05 ^{a)}
IV-19	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 131°C logP = 2,70 ^{a)}
IV-20	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 135°C logP = 1,97 ^{a)}
IV-21	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 143°C logP = 2,42 ^{a)}
IV-22	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 85°C logP = 2,58 ^{a)}

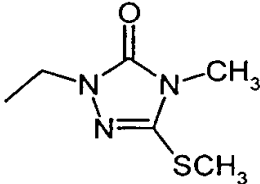
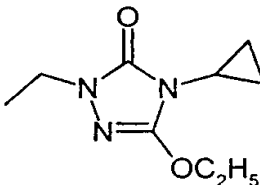
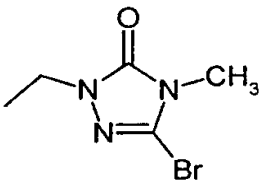
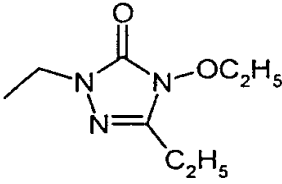
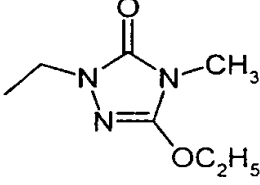
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-23	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	logP = 1,98 ^{a)}
IV-24	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	logP = 2,07 ^{a)}
IV-25	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 157°C logP = 2,94 ^{a)}
IV-26	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,53 ppm.
IV-27	(4-) NO ₂	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,48 ppm.
IV-28	(4-) NO ₂	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,30 ppm.

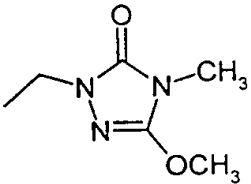
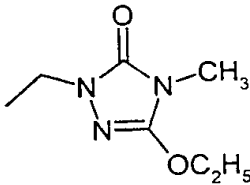
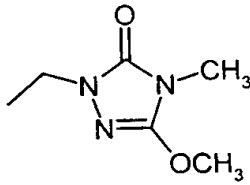
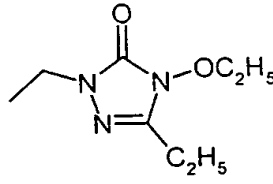
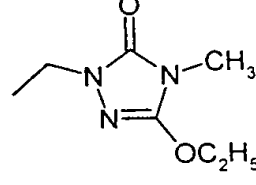
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-29	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,61 ppm.
IV-30	(4-) Cl	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,08 ppm.
IV-31	(4-) Cl	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,17 ppm.
IV-32	(4-) Cl	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,00 ppm
IV-33	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 1,53 ^{a)}

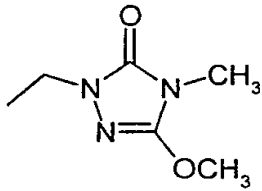
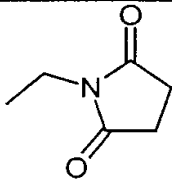
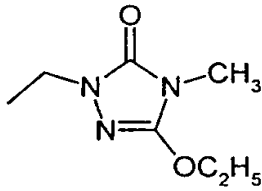
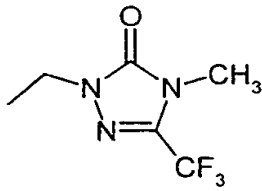
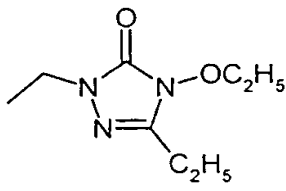
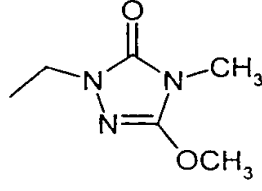
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-34	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,24 ^{a)}
IV-35	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,40 ^{a)}
IV-36	(4-) F	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,41 ^{a)}
IV-37	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,45 ^{a)}
IV-38	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,06 ^{a)}

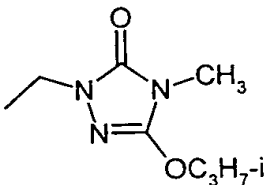
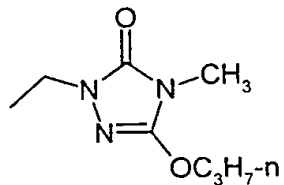
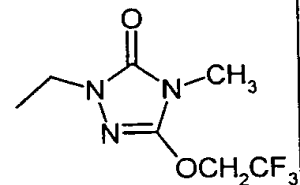
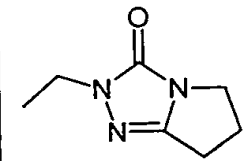
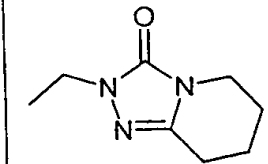
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-39	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,64 ^{a)}
IV-40	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,23 ^{a)}
IV-41	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,02 ^{a)}
IV-42	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,23 ^{a)}
IV-43	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,31 ^{a)}

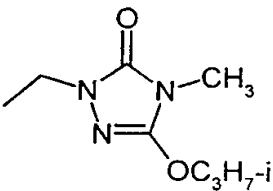
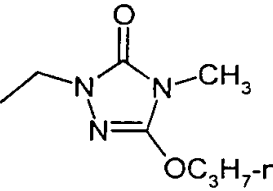
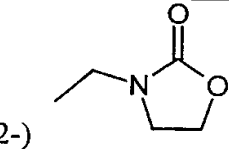
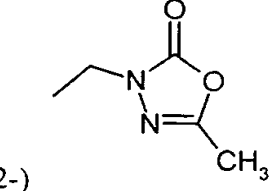
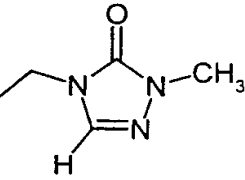
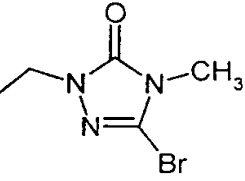
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-44	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,14 ^{a)}
IV-45	(4-) NO ₂	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,42 ^{a)}
IV-46	(4-) NO ₂	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,82 ^{a)}
IV-47	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,48 ^{a)}
IV-48	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,38 ^{a)}

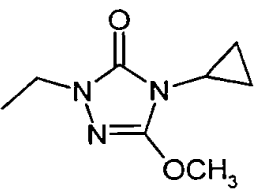
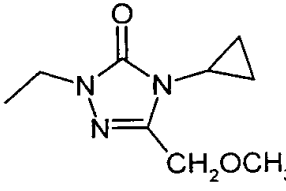
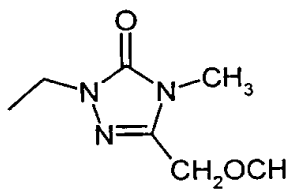
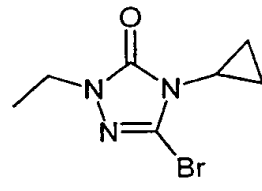
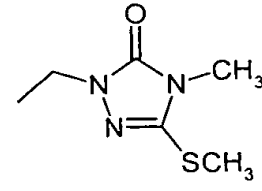
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-49	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,02 ^{a)}
IV-50	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₃ H ₇	logP = 3,91 ^{a)}
IV-51	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	
IV-52	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	
IV-53	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,37 ppm.

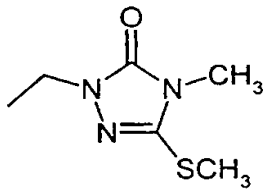
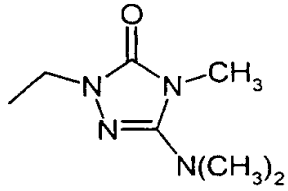
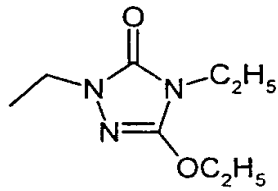
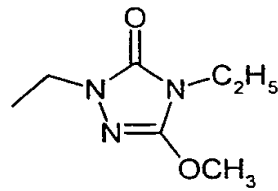
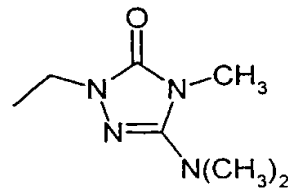
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-54	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,37 ppm.
IV-55	-	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	
IV-56	-	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,37 ppm.
IV-57	-	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,40 ppm.
IV-58	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,95 ^{a)}

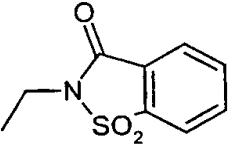
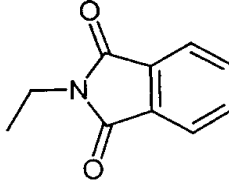
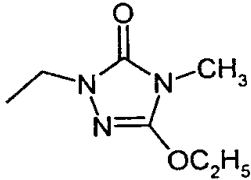
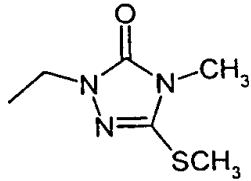
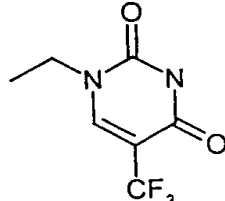
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-59	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,31 ppm.
IV-60	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,44 ^{a)}
IV-61	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,35 ppm.
IV-62	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,53 ppm.
IV-63	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,40 ppm.
IV-64	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,36 ppm.

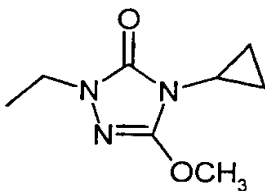
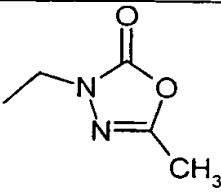
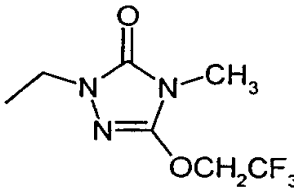
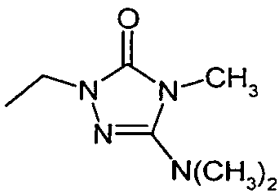
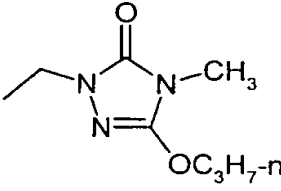
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-65	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,34 ^{a)}
IV-66	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,38 ^{a)}
IV-67	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,31 ^{a)}
IV-68	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,16 ^{a)}
IV-69	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,41 ^{a)}

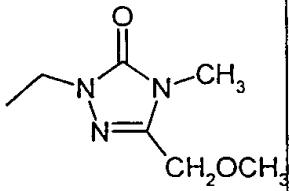
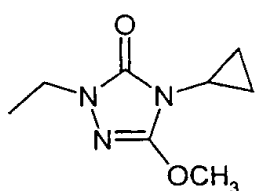
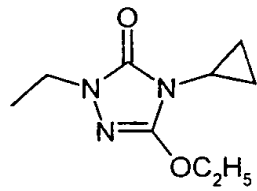
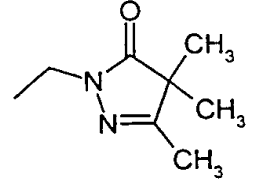
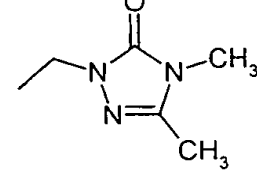
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-70	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,51 ^{a)}
IV-71	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,54 ^{a)}
IV-72	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,36 ^{a)}
IV-73	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,88 ^{a)}
IV-74	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,68 ^{a)}
IV-75	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,80 ^{a)}

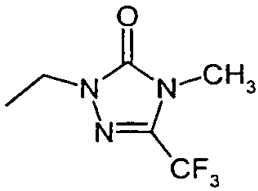
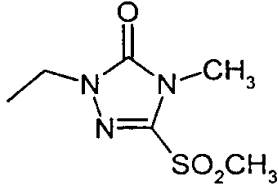
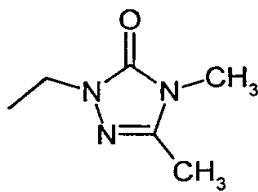
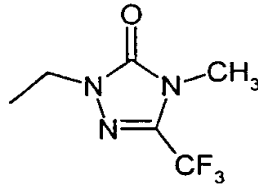
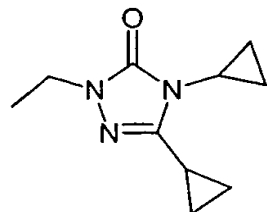
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-76	(4-) CF ₃	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,87 ^{a)}
IV-77	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,88 ^{a)}
IV-78	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,60 ^{a)}
IV-79	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,35 ^{a)}
IV-80	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,86 ^{a)}

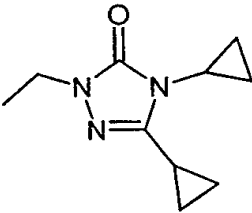
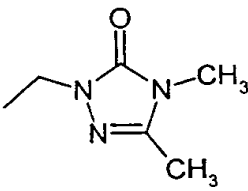
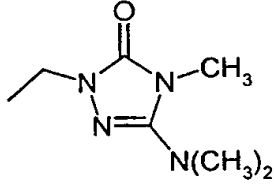
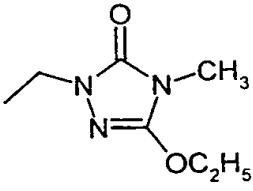
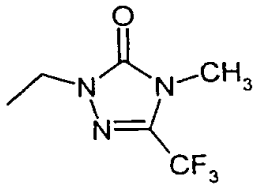
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-81	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,83 ^{a)}
IV-82	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,60 ^{a)}
IV-83	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,36 ppm.
IV-84	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,37 ppm.
IV-85	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,79 ^{a)}

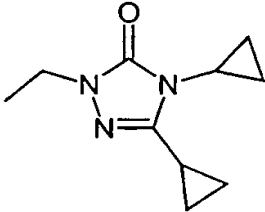
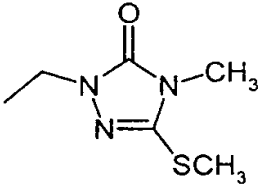
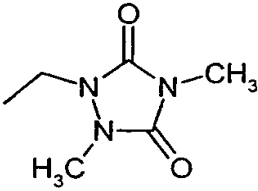
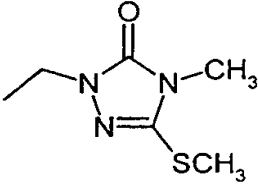
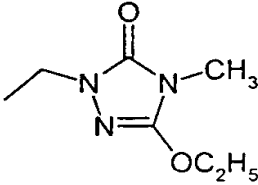
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-86	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,67 ^{a)}
IV-87	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,80 ^{a)}
IV-88	(3-) CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,54 ^{a)}
IV-89	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 1,82 ^{a)}
IV-90	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,93 ^{a)}

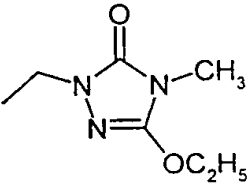
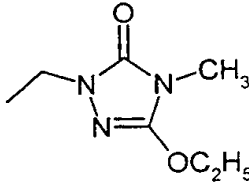
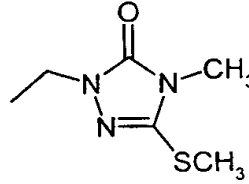
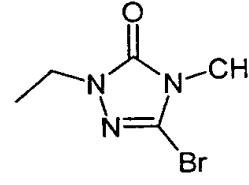
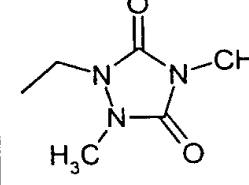
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-91	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,08 ^{a)}
IV-92	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,04 ^{a)}
IV-93	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,45 ^{a)}
IV-94	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,21 ^{a)}
IV-95	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,96 ^{a)}

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-96	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,05 ^{a)}
IV-97	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,50 ^{a)}
IV-98	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,89 ^{a)}
IV-99	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,91 ^{a)}
IV-100	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,39 ppm.

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-101	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,50 ppm.
IV-102	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,49 ppm.
IV-103	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,29 ppm.
IV-104	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,53 ppm.
IV-105	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,34 ppm.

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-106	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,39 ppm.
IV-107	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,43 ppm.
IV-108	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,40 ppm.
IV-109	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,38 ppm.
IV-110	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,49 ppm.

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-111	-	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,3 ppm.
IV-112	-	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,44 ppm.
IV-113	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,58^a$
IV-114	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	OCH_3	$\log P = 1,53^a$
IV-115	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	OCH_3	$\log P = 1,59^a$

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-116	(4-) I	-	(2-) 	OCH ₃	logP = 2,68 ^{a)}
IV-117	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OCH ₃	logP = 2,74 ^{a)}
IV-118	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OCH ₃	logP = 2,65 ^{a)}
IV-119	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,96 ^{a)}
IV-120	-	-	(2-) 	OCH ₃	Fp.: 106°C

Die Bestimmung der in Tabelle 4 angegebenen logP-Werte erfolgte gemäß EEC-Directive 79/831 Annex V.A8 durch HPLC (High Performance Liquid Chromatography) an einer Phasenumkehrsäule (C 18). Temperatur: 43°C.

(a) Eluenten für die Bestimmung im sauren Bereich: 0,1% wässrige Phosphorsäure, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit a) markiert.

5

(b) Eluenten für die Bestimmung im neutralen Bereich: 0,01-molare wässrige Phosphatpuffer-Lösung, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit b) markiert.

10 Die Eichung erfolgte mit unverzweigten Alkan-2-onen (mit 3 bis 16 Kohlenstoffatomen), deren logP-Werte bekannt sind (Bestimmung der logP-Werte anhand der Retentionszeiten durch lineare Interpolation zwischen zwei aufeinanderfolgenden Alkanonen).

15 Die lambda-max-Werte wurden an Hand der UV-Spektren von 200 nm bis 400 nm in den Maxima der chromatographischen Signale ermittelt.

Anwendungsbeispiele:Beispiel A

Pre-emergence-Test

5

Lösungsmittel: 5 Gewichtsteile Aceton

Emulgator: 1 Gewichtsteil Alkylarylpolglykolether

10 Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit der angegebenen Menge Lösungsmittel, gibt die angegebene Menge Emulgator zu und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die gewünschte Konzentration.

15 Samen der Testpflanzen werden in normalen Boden ausgesät. Nach ca. 24 Stunden wird der Boden so mit der Wirkstoffzubereitung besprüht, dass die jeweils gewünschte Wirkstoffmenge pro Flächeneinheit ausgebracht wird. Die Konzentration der Spritzbrühe wird so gewählt, dass in 1000 Liter Wasser pro Hektar die jeweils gewünschte Wirkstoffmenge ausgebracht wird.

20 Nach drei Wochen wird der Schädigungsgrad der Pflanzen bonitiert in % Schädigung im Vergleich zur Entwicklung der unbehandelten Kontrolle.

Es bedeuten:

25 0 % = keine Wirkung (wie unbehandelte Kontrolle)
 100 % = totale Vernichtung

30 In diesem Test zeigen beispielsweise die Verbindungen gemäß Herstellungsbeispiel 2 und 3 bei guter Verträglichkeit gegenüber Kulturpflanzen, wie z.B. Mais, starke Wirkung gegen Unkräuter.

Beispiel B

Post-emergence-Test

- 5 Lösungsmittel: 5 Gewichtsteile Aceton
Emulgator: 1 Gewichtsteil Alkylarylpolyglykoether

10 Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man
1 Gewichtsteil Wirkstoff mit der angegebenen Menge Lösungsmittel, gibt die ange-
gebene Menge Emulgator zu und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die ge-
wünschte Konzentration.

15 Mit der Wirkstoffzubereitung spritzt man Testpflanzen, welche eine Höhe von 5 -
15 cm haben so, dass die jeweils gewünschten Wirkstoffmengen pro Flächeneinheit
ausgebracht werden. Die Konzentration der Spritzbrühe wird so gewählt, dass in
1000 l Wasser/ha die jeweils gewünschten Wirkstoffmengen ausgebracht werden.

20 Nach drei Wochen wird der Schädigungsgrad der Pflanzen bonitiert in % Schädigung
im Vergleich zur Entwicklung der unbehandelten Kontrolle.

Es bedeuten:

0 % = keine Wirkung (wie unbehandelte Kontrolle)

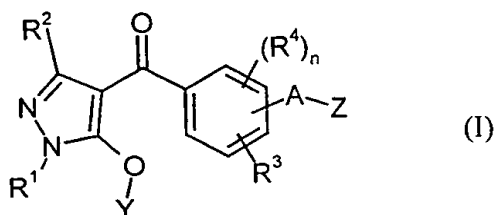
100 % = totale Vernichtung

25

In diesem Test zeigen beispielsweise die Verbindung gemäß Herstellungsbeispiel 2
und 3 starke Wirkung gegen Unkräuter.

Patentansprüche

1. Substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I),



5

in welcher

n für die Zahlen 0, 1, 2 oder 3 steht,

10

A für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) steht,

R¹ für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkenyl, Alkynyl oder Cycloalkyl steht,

15

R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkoxy-carbonyl oder Cycloalkyl steht,

20

R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

25

R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

Y für Wasserstoff oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxy carbonyl, Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl, Dialkylaminocarbonyl, Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkenylsulfonyl, Alkinyl, Alkinylcarbonyl, Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl, Cycloalkylalkyl, Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenylalkyl oder Phenylcarbonylalkyl steht, und

Z für eine gegebenenfalls substituierte 4- bis 12-gliedrige, gesättigte oder ungesättigte, monocyclische oder bicyclische, heterocyclische Gruppierung steht, welche 1 bis 4 Heteroatome (bis zu 4 Stickstoffatome und gegebenenfalls - alternativ oder additiv - ein Sauerstoffatom oder ein Schwefelatom, oder eine SO-Gruppierung oder eine SO₂-Gruppierung) enthält, und welche zusätzlich ein bis drei Oxo-Gruppen (C=O) und/oder Thioxo-Gruppen (C=S) als Bestandteile des Heterocyclus enthält,

einschließlich aller möglichen tautomeren Formen und der möglichen Salze.

2. Verbindungen gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß

n für die Zahlen 0, 1 oder 2 steht,

A für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen steht,

R¹ für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkyl-carbonyl, C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-

carbonyl substituiertes Alkenyl oder Alkynyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen steht,

5

R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy oder Alkoxycarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylthio mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen steht,

10

R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen steht,

15

20

R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen steht,

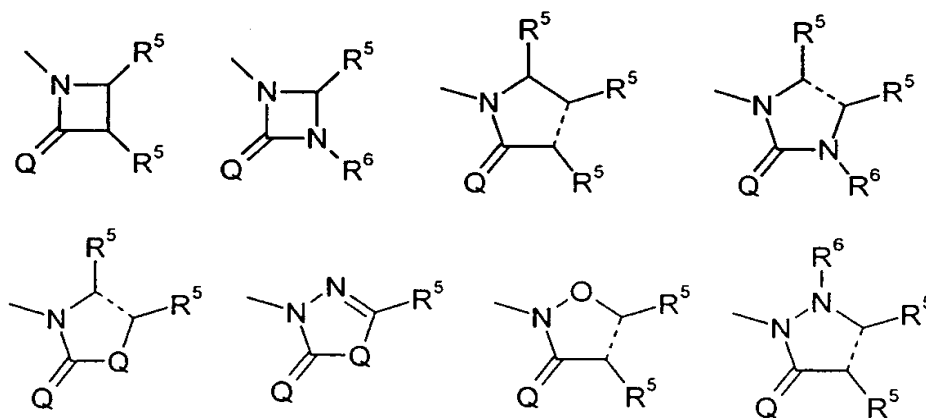
25

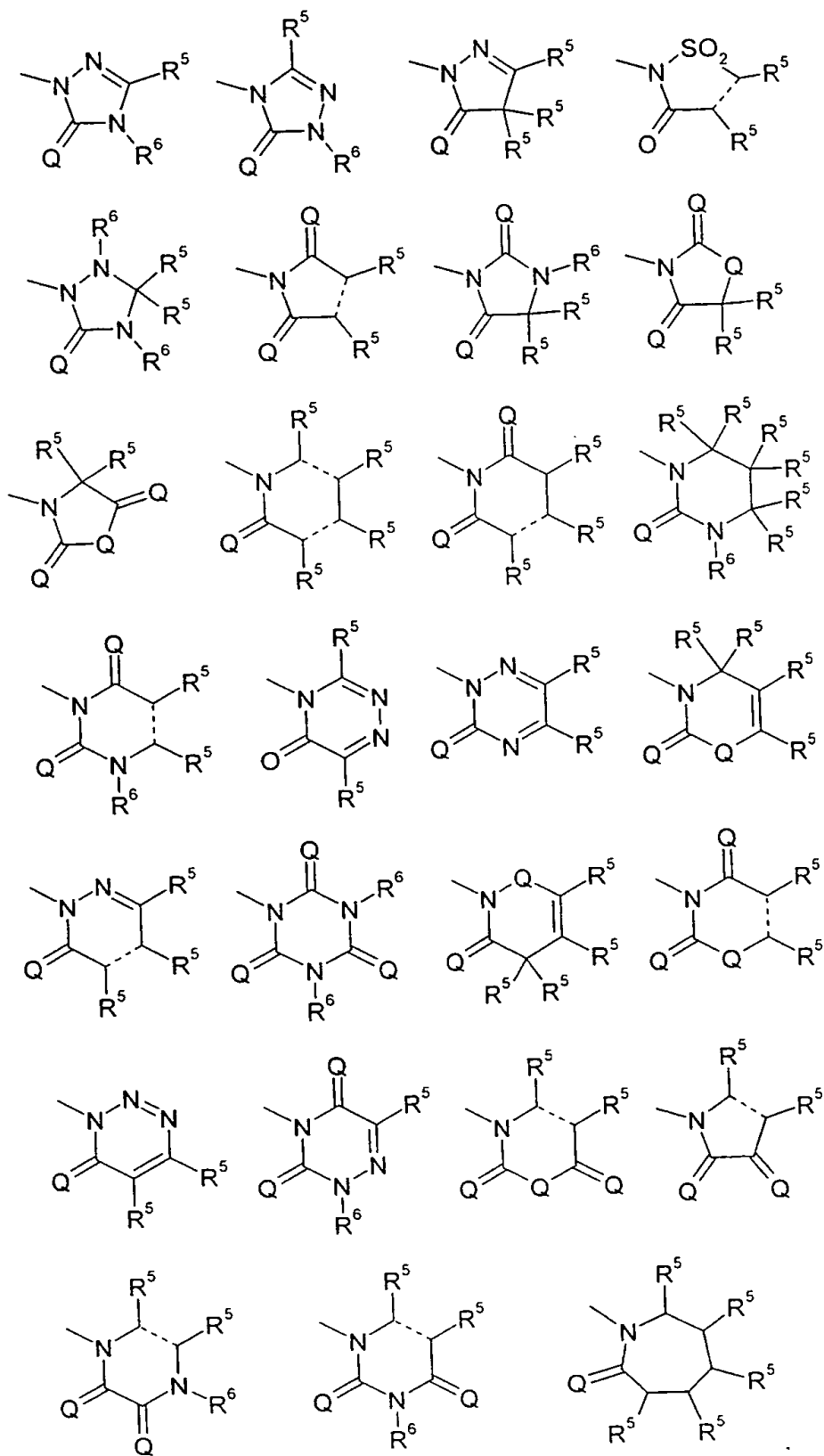
30

Y für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl substituiertes Alkyl,

Alkylcarbonyl oder Alkoxycarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl oder Dialkylaminocarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils
 5 gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkinyl oder Alkinylcarbonyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenylsulfonyl mit bis zu 6 Kohlenstoffatomen für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen
 10 oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl oder Cycloalkylalkyl mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls 1 bis 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy
 15 oder C₁-C₄-Halogenalkoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenyl-C₁-C₄-alkyl oder Phenylcarbonyl-C₁-C₄-alkyl steht, und

Z für eine der nachstehenden heterocyclischen Gruppierungen steht





worin jeweils die gestrichelt gezeichnete Bindung eine Einfachbindung oder eine Doppelbindung ist,

- 5 Q für Sauerstoff oder Schwefel steht,
- R⁵ für Wasserstoff, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Halogen, für
 jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy,
 C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsul-
10 fonyl substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxy, Alkoxy-
 carbonyl, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit
 jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen. für
 Propadienylthio, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen
 substituiertes Alkylamino oder Dialkylamino mit jeweils bis zu
15 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gege-
 benenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkinyl,
 Alkenyloxy, Alkenylthio oder Alkenylamino mit jeweils bis zu
 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkinylgruppen, für
 jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cyclo-
20 alkyl, Cycloalkyloxy, Cycloalkylthio, Cycloalkylamino,
 Cycloalkylalkyl, Cycloalkylalkoxy, Cycloalkylalkylthio oder
 Cycloalkylalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen
 in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls bis zu 4 Kohlen-
 stoffatomen im Alkylteil, für jeweils gegebenenfalls durch
25 Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes
 Phenyl, Phenylloxy, Phenylthio, Phenylamino, Benzyl, Benzyl-
 oxy, Benzylthio oder Benzylamino steht, für Pyrrolidino,
 Piperidino oder Morpholino steht, oder - für den Fall, daß zwei
 benachbarte Reste R⁵ und R⁵ sich an einer Doppelbindung be-
30 finden - zusammen mit dem benachbarten Rest R⁵ auch für
 eine Benzogruppierung steht, und

- 5 R^6 für Wasserstoff, Hydroxy, Amino, Alkylidenamino mit bis zu 4 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen oder C_1 - C_4 -Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylamino, Dialkylamino oder Alkanoylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkynyl oder Alkenyloxy mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkynylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylalkyl oder Cycloalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls bis zu 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C_1 - C_4 -Alkyl oder C_1 - C_4 -Alkoxy substituiertes Phenyl oder Benzyl steht, oder zusammen mit einem benachbarten Rest R^5 oder R^6 für gegebenenfalls durch Halogen oder C_1 - C_4 -Alkyl substituiertes Alkandiyl mit 3 bis 5 Kohlenstoffatomen steht,
- 10
- 15
- 20 wobei die einzelnen Reste R^5 und R^6 - soweit mehrere davon an gleiche heterocyclische Gruppierungen gebunden sind, gleiche oder verschiedene Bedeutungen im Rahmen der obigen Definition haben können.
- 25 3. Verbindungen gemäß Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, daß
- n für die Zahlen 0 oder 1 steht,
- A für eine Einfachbindung, Methylen, Ethyliden (Ethan-1,1-diyl) oder Dimethylen (Ethan-1,2-diyl) steht.
- 30

R¹ für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propinyl oder Butinyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl steht,

R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, n- oder i-Propoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, oder für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl steht,

R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, Iod, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, oder für Me-

thylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylaminosulfonyl steht,

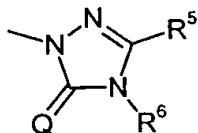
- 5 R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, oder für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylaminosulfonyl steht,
- 10
- 15
- 20 R⁵ für Wasserstoff, Hydroxy, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Difluormethyl, Dichlormethyl, Trifluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Fluordichlormethyl, Fluorethyl, Chlorethyl, Difluorethyl, Dichlorethyl, Fluor-n-propyl, Fluor-i-propyl, Chlor-n-propyl, Chlor-i-propyl, Methoxymethyl, Ethoxymethyl, Methoxyethyl, Ethoxyethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Fluorethoxy, Chlorethoxy, Difluorethoxy, Dichlorethoxy, Trifluorethoxy, Trichlorethoxy, Chlorfluorethoxy, Chlordifluorethoxy, Fluordichlorethoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Fluorethylthio, Chlorethylthio, Difluorethylthio, Dichlorethylthio, Chlorfluorethylthio, Chlordifluorethylthio, Fluordichlorethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, Dimethylamino, Propenylthio, Butenylthio, Propinylthio, Butinylthio,
- 25
- 30

Cyclopropyl, Cyclopropylmethyl, Cyclopropylmethoxy, Phenyl oder Phenoxy steht,

- 5 R⁶ für Amino, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, Methylamino, Dimethylamino, Cyclopropyl oder Cyclopropylmethyl steht, oder zusammen mit R⁵ für Propan-1,3-diyl (Trimethylen), Butan-1,4-diyl (Tetramethylen) oder Pentan-1,5-diyl (Pentamethylen) steht, und
- 10 Y für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, Acetyl, Propionyl, n- oder i-Butyryl, Methoxycarbonyl oder Ethoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor und/oder Brom substituiertes Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, n-, i-, s- oder t-Butylsulfonyl, Methylaminocarbonyl, Ethylaminocarbonyl, n- oder i-Propylaminocarbonyl, Dimethylaminocarbonyl oder Diethylaminocarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propenylcarbonyl, Butenylcarbonyl, Propenylsulfonyl, Butenylsulfonyl, Propinyl, Butinyl, Propinylcarbonyl oder Butinylcarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropylcarbonyl, Cyclobutylcarbonyl, Cyclopentylcarbonyl, Cyclohexylcarbonyl, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl oder Cyclohexylmethyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Trifluormethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Difluormethoxy oder Trifluormethoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Benzyl oder Phenylcarbonylmethyl steht.
- 20
- 25
- 30

4. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, daß

Z für die folgende Gruppierung steht



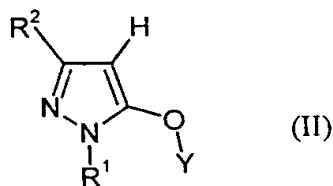
5. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, daß

Q für Sauerstoff steht.

6. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, daß n für 0 steht.

7. Verfahren zum Herstellen von Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, daß man

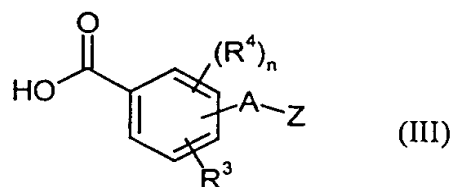
(a) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)



in welcher

R¹, R² und Y die in einem der Ansprüche 1 bis 3 angegebene Bedeutung haben,

mit substituierten Benzoesäuren der allgemeinen Formel (III),



in welcher

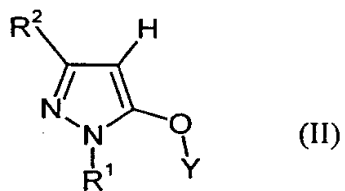
5 n, A, R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben,

in Gegenwart eines Dehydratisierungsmittels, gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart
10 eines Verdünnungsmittels umsetzt,

oder daß man

(b) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)

15

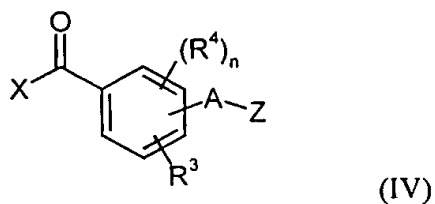


in welcher

20 R¹, R² und Y die in einem der Ansprüche 1 bis 3 angegebene Bedeutung haben,

mit substituierten Benzoesäurederivaten der allgemeinen Formel (IV)

- 158 -



in welcher

n, A, R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben, und

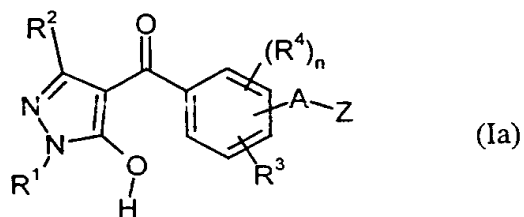
X für Cyano, Halogen oder Alkoxy steht,

- oder mit entsprechenden Carbonsäureanhydriden -

gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umgesetzt,

oder daß man

(c) substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (Ia)



in welcher

n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben,

mit Verbindungen der allgemeinen Formel (V)

H-Y (V)

in welcher

5 Y mit Ausnahme von Wasserstoff die in einem der Ansprüche 1 bis 4 angegebene Bedeutung hat,

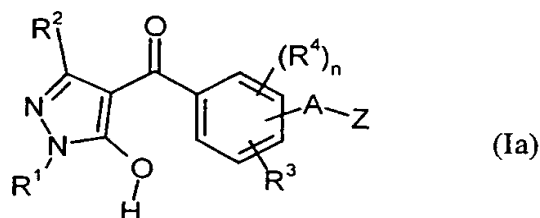
- oder gegebenenfalls mit entsprechenden Isocyanaten oder Isothiocyanaten -

10 gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umgesetzt,

15 und gegebenenfalls im Anschluß daran an den so erhaltenen Verbindungen der Formel (I) im Rahmen der Substituentendefinition auf übliche Weise elektrophile oder nucleophile bzw. Oxidations- oder Reduktionsreaktionen durchführt oder die Verbindungen der Formel (I) auf übliche Weise in Salze überführt.

8. Verbindungen der allgemeinen Formel (Ia)

20



(Ia)

in welcher

25 n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben.

9. Herbizide Mittel, gekennzeichnet durch den Gehalt mindestens einer Verbindung gemäß einem der Ansprüche 1 bis 6 und üblichen Streckmitteln. .
10. Verwendung von mindestens einer Verbindung gemäß einem der Ansprüche .
5 1 bis 6 zur Bekämpfung von unerwünschten Pflanzen.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Inte. .dional Application No

PCT/EP 00/02292

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC 7 C07D403/10 A01N43/653 A01N43/56 C07D401/10 C07D417/10
C07D471/04 C07D231/20 C07D413/10 C07D487/04

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC 7 C07D A01N

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 99 07697 A (DEYN WOLFGANG VON ;HILL REGINA LUISE (DE); RHEINHEIMER JOACHIM (DE) 18 February 1999 (1999-02-18) page 78, line 21 -page 79, line 7	1,8-10
X	WO 98 42678 A (DOW AGROSCIENCES LLC) 1 October 1998 (1998-10-01) page 50, line 19 -page 51, line 15	1,8
A	WO 98 31681 A (DEYN WOLFGANG VON ;HILL REGINA LUISE (DE); RHEINHEIMER JOACHIM (DE) 23 July 1998 (1998-07-23) claim 1	1,9,10
A	EP 0 900 795 A (NIPPON SODA CO) 10 March 1999 (1999-03-10) claims	1,9,10
	-/--	

☒ Further documents are listed in the continuation of box C.

☒ Patent family members are listed in annex.

* Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier document but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

17 July 2000

Date of mailing of the international search report

27/07/2000

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

De Jong, B

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Int. J. Application No

PCT/EP 00/02292

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	<p>US 5 846 907 A (HILL REGINA LUISE ET AL) 8 December 1998 (1998-12-08) claims; examples</p>	1,9,10

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP 00/02292

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 9907697	A	18-02-1999	AU 9066598 A EP 1003736 A	01-03-1999 31-05-2000
WO 9842678	A	01-10-1998	AU 6579198 A EP 0918755 A US 5824802 A US 5962690 A	20-10-1998 02-06-1999 20-10-1998 05-10-1999
WO 9831681	A	23-07-1998	AU 6092998 A AU 6207698 A AU 6613398 A CN 1248255 T CN 1250447 T WO 9831676 A WO 9831682 A EP 0966452 A EP 0958291 A EP 0958292 A NO 993521 A NO 993522 A PL 334847 A PL 334849 A SK 90399 A SK 91999 A	07-08-1998 07-08-1998 07-08-1998 22-03-2000 12-04-2000 23-07-1998 23-07-1998 29-12-1999 24-11-1999 24-11-1999 15-09-1999 16-09-1999 27-03-2000 27-03-2000 10-12-1999 18-01-2000
EP 0900795	A	10-03-1999	JP 10007673 A AU 1671097 A BR 9708828 A AU 1670797 A AU 1670897 A AU 1670997 A AU 2405897 A CA 2252543 A CN 1216534 A CN 1216543 A EP 0891972 A HU 9902423 A JP 10237072 A WO 9741116 A WO 9735850 A WO 9741117 A WO 9741118 A WO 9741105 A WO 9821187 A	13-01-1998 19-11-1997 03-08-1999 19-11-1997 17-10-1997 19-11-1997 19-11-1997 06-11-1997 12-05-1999 12-05-1999 20-01-1999 29-11-1999 08-09-1998 06-11-1997 02-10-1997 06-11-1997 06-11-1997 06-11-1997 22-05-1998
US 5846907	A	08-12-1998	AU 710172 B AU 4665596 A BG 101825 A BR 9607333 A CA 2210693 A CN 1175951 A CZ 9702473 A WO 9626206 A EP 0811007 A FI 973471 A HU 9800725 A JP 11500438 T LT 97145 A, B	16-09-1999 11-09-1996 30-04-1998 25-11-1997 29-08-1996 11-03-1998 13-05-1998 29-08-1996 10-12-1997 22-08-1997 28-07-1998 12-01-1999 26-01-1998

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

information on patent family members

International Application No

PCT/EP 00/02292

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 5846907 A		LV 11895 A	20-12-1997
		LV 11895 B	20-03-1998
		NO 973861 A	22-10-1997
		NZ 301272 A	25-02-1999
		PL 322277 A	19-01-1998
		SK 104297 A	08-07-1998

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 00/02292

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

IPK 7 C07D403/10 A01N43/653 A01N43/56 C07D401/10 C07D417/10
C07D471/04 C07D231/20 C07D413/10 C07D487/04

Nach der internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

IPK 7 C07D A01N

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 99 07697 A (DEYN WOLFGANG VON ;HILL REGINA LUISE (DE); RHEINHEIMER JOACHIM (DE) 18. Februar 1999 (1999-02-18) Seite 78, Zeile 21 -Seite 79, Zeile 7	1,8-10
X	WO 98 42678 A (DOW AGROSCIENCES LLC) 1. Oktober 1998 (1998-10-01) Seite 50, Zeile 19 -Seite 51, Zeile 15	1,8
A	WO 98 31681 A (DEYN WOLFGANG VON ;HILL REGINA LUISE (DE); RHEINHEIMER JOACHIM (DE) 23. Juli 1998 (1998-07-23) Anspruch 1	1,9,10
A	EP 0 900 795 A (NIPPON SODA CO) 10. März 1999 (1999-03-10) Ansprüche	1,9,10

-/-

☒ Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen

☒ Siehe Anhang Patentfamilie

* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

"A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist

"E" älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist

"L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)

"O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht

"P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

"T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

"X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden

"Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

"&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

17. Juli 2000

Abmeldedatum des internationalen Recherchenberichts

27/07/2000

Name und Postanschrift der internationalen Recherchenbehörde
Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

De Jong, B

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Inte. onales Aktenzeichen

PCT/EP 00/02292

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	<p>US 5 846 907 A (HILL REGINA LUISE ET AL)</p> <p>8. Dezember 1998 (1998-12-08)</p> <p>Ansprüche; Beispiele</p> <p>-----</p>	1,9,10

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Inter. nationales Aktenzeichen

PCT/EP 00/02292

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 9907697 A	18-02-1999	AU 9066598 A EP 1003736 A	01-03-1999 31-05-2000
WO 9842678 A	01-10-1998	AU 6579198 A EP 0918755 A US 5824802 A US 5962690 A	20-10-1998 02-06-1999 20-10-1998 05-10-1999
WO 9831681 A	23-07-1998	AU 6092998 A AU 6207698 A AU 6613398 A CN 1248255 T CN 1250447 T WO 9831676 A WO 9831682 A EP 0966452 A EP 0958291 A EP 0958292 A NO 993521 A NO 993522 A PL 334847 A PL 334849 A SK 90399 A SK 91999 A	07-08-1998 07-08-1998 07-08-1998 22-03-2000 12-04-2000 23-07-1998 23-07-1998 29-12-1999 24-11-1999 24-11-1999 15-09-1999 16-09-1999 27-03-2000 27-03-2000 10-12-1999 18-01-2000
EP 0900795 A	10-03-1999	JP 10007673 A AU 1671097 A BR 9708828 A AU 1670797 A AU 1670897 A AU 1670997 A AU 2405897 A CA 2252543 A CN 1216534 A CN 1216543 A EP 0891972 A HU 9902423 A JP 10237072 A WO 9741116 A WO 9735850 A WO 9741117 A WO 9741118 A WO 9741105 A WO 9821187 A	13-01-1998 19-11-1997 03-08-1999 19-11-1997 17-10-1997 19-11-1997 19-11-1997 06-11-1997 12-05-1999 12-05-1999 20-01-1999 29-11-1999 08-09-1998 06-11-1997 02-10-1997 06-11-1997 06-11-1997 06-11-1997 22-05-1998
US 5846907 A	08-12-1998	AU 710172 B AU 4665596 A BG 101825 A BR 9607333 A CA 2210693 A CN 1175951 A CZ 9702473 A WO 9626206 A EP 0811007 A FI 973471 A HU 9800725 A JP 11500438 T LT 97145 A, B	16-09-1999 11-09-1996 30-04-1998 25-11-1997 29-08-1996 11-03-1998 13-05-1998 29-08-1996 10-12-1997 22-08-1997 28-07-1998 12-01-1999 26-01-1998

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 00/02292

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
US 5846907 A		LV 11895 A	20-12-1997
		LV 11895 B	20-03-1998
		NO 973861 A	22-10-1997
		NZ 301272 A	25-02-1999
		PL 322277 A	19-01-1998
		SK 104297 A	08-07-1998